

# Mesure invariante en mécanique quantique

## Notes pour l'école d'été des Gustins 2020

Tony Jin

August 28, 2020

Dans cet exposé on s'intéressera à la définition et à l'étude de mesures invariantes en mécanique quantique, plus précisément on cherchera à formuler l'équivalent de l'ensemble microcanonique de la physique classique.

L'un des buts de la thermodynamique statistique classique est d'étudier les propriétés des systèmes à l'équilibre. Que veut-on dire par équilibre? À l'échelle microscopique les particules ne sont jamais au repos à cause du chaos moléculaire. Cependant, leur distribution de probabilité peut être indépendante du temps. Lorsque c'est le cas, on dit qu'on a atteint un état stationnaire ou un état d'équilibre.

L'hypothèse ergodique en physique classique stipule que, pour un système isolé avec une énergie fixée, le système est tel qu'il explore toute ses configurations possibles avec un temps égal. Pour obtenir les propriétés statistiques du système, on peut remplacer la moyenne temporelle par une *moyenne d'ensemble* qu'on appelle l'ensemble microcanonique. L'ensemble microcanonique stipule simplement que pour un système classique à énergie fixée  $E$  à laquelle correspond un nombre de configurations microscopique  $N$ , la probabilité pour le système d'être dans une de ces configurations vaut  $1/N$ .

Prenons un exemple simple classique. Considérons une bille dans une boîte avec seulement deux emplacements notés 0 et 1. Si l'énergie de la bille dans l'emplacement 0 est la même que dans l'emplacement 1, la probabilité associée à chaque configuration est simplement  $1/2$ .

On va voir que cet exemple simple peut déjà donner du fil à retordre pour sa version quantique.

En effet en mécanique *le principe de superposition* stipule qu'un système en mécanique quantique peut être dans des superpositions de configurations classiques. Comment définit-on alors le fait "d'explorer toutes les configurations possibles à énergie fixée"?

Dans cette présentation, nous allons voir comment procéder en présentant l'exemple simple d'un système à deux états quantique.

Avant de nous lancer dans le coeur du sujet, nous commençons par quelques rappels de :

## 1 Mécanique quantique

Nous définissons tout pour un système à deux états et laissons au lecteur le soin d'extrapoler les généralisations pour un système de dimension quelconque. L'espace mathématique dans lequel vivent les objets de la mécanique quantique est un *espace de Hilbert*, c'est-à-dire un espace vectoriel sur  $\mathbb{C}$  muni d'un produit scalaire hermitien qui sera de dimension 2 pour nous.

Les éléments de base se notent ainsi :

$$\{|0\rangle, |1\rangle\} \tag{1}$$

et un élément de l'espace  $|\psi\rangle$ .

Dirac a eu cette idée géniale de noter les éléments de l'espace dual par  $\langle 0|, \langle 1|$ .

Le produit scalaire entre deux éléments  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$  admet une notation élégante :  $\langle \psi|\phi\rangle$ .

Les éléments de l'espace vectoriel sont sujets à deux contraintes :

- Ils sont de norme 1. Cela vient de l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde :  
En mécanique quantique on définit les *observables* comme des matrices hermitiennes  $\in \text{End}(\mathcal{H})$ .  
Pour une observable donnée  $\hat{O}$ , on note  $\{|\lambda_i\rangle, \lambda_i\}_i$  son système de valeurs propres et vecteurs propres. Un état donné s'écrit en général  $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle$ . On postule que  $|\alpha_i|^2$  représente la *probabilité* d'obtenir le résultat  $\lambda_i$  lorsqu'on mesure l'observable  $\hat{O}$  pour un système décrit par la fonction d'onde  $|\psi\rangle$ .  
Exemple : Soit  $\hat{O}$  une observable valant 1 lorsque le système est dans l'état  $|1\rangle$  et -1 s'il est dans l'état  $|0\rangle$  :

$$\hat{O} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Soit  $|\psi\rangle$  l'état du système  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ . Lorsqu'on fait la mesure de  $\hat{O}$ , on a une probabilité 1/2 d'obtenir 1 et 1/2 d'obtenir -1.

- Il y a identification de tous les éléments qui appartiennent à l'orbite générée par  $U(1)$ .

$$|\psi\rangle \equiv e^{i\theta} |\psi\rangle \quad (3)$$

Une façon un peu simpliste et peu générale mais pratique de voir la mécanique quantique est de voir les éléments de base comme des configurations classiques possibles. Donc un état quantique couvre un ensemble plus complexe car on a toutes les superpositions en plus.

**Évolution** Pour des systèmes fermés, les transformations possibles des états quantiques sont celles qui préservent la norme Hermitienne, c'est-à-dire les éléments du groupe spécial unitaire de dimension  $d$   $SU(d)$  où  $d$  est la dimension de l'espace de Hilbert. On les note  $U$ . Une transformation générique s'écrit donc

$$|\psi\rangle \rightarrow U |\psi\rangle \quad (4)$$

Comme on ne s'intéressera par la dynamique ici, on ne fera pas mention de l'équation de Schrödinger.

**Produit tensoriel** On peut créer des espaces quantiques plus grands en prenant des produits tensoriels.

On construit une nouvelle base à partir de deux copies de la base précédente. On note les éléments

$$\{|0, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle\} \quad (5)$$

qui hérite d'un produit scalaire naturelle de la part de son comparse non tensorisé.

À tout élément  $(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  on associe un objet dénoté  $|\psi_1, \psi_2\rangle$  dont les éléments se lisent comme le produit  $a_i b_j$  de la décomposition sur la base d'avant.

L'espace produit tensoriel est à nouveau un espace de Hilbert.

**Matrice densité** La matrice densité est un formalisme permettant de traiter la double origine possible du hasard en mécanique quantique. En effet, il y a deux origines possibles au hasard : l'incertitude liée à la mesure liée à l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde et l'incertitude classique qui vient du fait qu'il peut y avoir du hasard dans la préparation des états comme en physique classique.

On la note  $\rho$ ,  $\rho \in \text{End}(\mathcal{H})$ , hermitienne.  $\rho$  est telle que  $\text{tr}(\rho) = 1$ .

La façon générale d'écrire une matrice densité est la suivante :

$$\rho = \sum p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (6)$$

où  $p_i$  représente la *probabilité classique* pour le système d'être dans un état purement quantique  $|\psi_i\rangle$ . La probabilité après mesure d'obtenir le résultat  $\lambda_i$  pour la mesure d'une observable  $\hat{O}$  est donnée par :

$$\text{tr}(\rho |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|) \quad (7)$$

qui tient compte à la fois des probabilités classiques et quantiques.

$\rho$  hérite naturellement d'une action de celle qui agit sur  $|\psi\rangle$  :

$$\rho \rightarrow U\rho U^\dagger \quad (8)$$

## 2 Mesure invariante pour le système à deux niveaux sans énergie.

Nous sommes maintenant prêts à regarder la version quantique de l'exemple simple du système à deux niveaux présenté en introduction.

Une paramétrisation possible qu'on appelle la représentation en sphère de Bloch (voir fig.1) de notre système à deux niveaux est :

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (9)$$

avec  $\theta \in [0, \pi]$ ,  $\phi \in [0, 2\pi]$ .

Les états sur la sphère représentent les états purs. Les états dans la boule représentent des états mixtes, c'est-à-dire des mélanges avec incertitude classique d'états quantiques. La paramétrisation pour les états mixtes est la suivante :

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}) \quad (10)$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_z & a_x - ia_y \\ a_x + ia_y & 1 - a_z \end{pmatrix} \quad (11)$$

On écrit alors la moyenne de  $\rho$  sur la distribution stationnaire de la façon suivante :

$$\mathbb{E}[\rho] = \int_{U \in SU(2)} d\eta(U) U \rho U^\dagger \quad (12)$$

avec  $\eta$  la mesure de Haar, c'est-à-dire l'unique mesure uniforme sur le groupe spécial unitaire. Mathématiquement  $d\eta(U_1^\dagger U) = d\eta(UU_1^\dagger) = d\eta(U) = d\eta(U^\dagger)$ ,  $\forall U_1, U \in SU(2)$ . L'esprit de cette formule est de dire que dans l'état stationnaire, toutes les configurations possibles de  $\rho$  engendrées

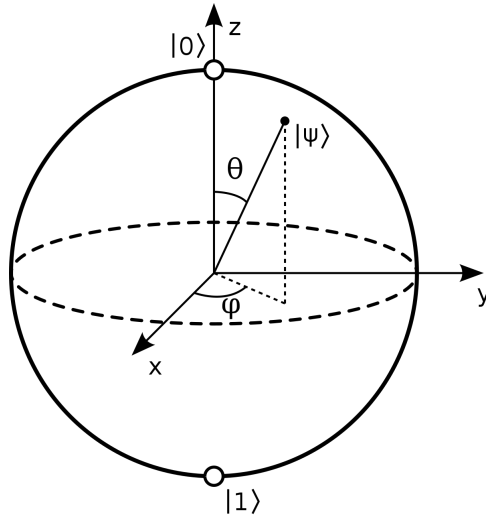


FIGURE 1 : Sphère de Bloch

par les opérations unitaires sont possibles et ont pour poids de probabilité la mesure uniforme  $d\eta(U)$ .

Pour trouver explicitement l'expression de cette mesure d'intégration pour une paramétrisation de  $U$  donné, on écrit la métrique invariante associée  $\text{tr}(dU dU^\dagger)$ .

Une façon générale de fixer la paramétrisation de  $U$  sur  $SU(2)$  est :

$$U_{\vec{n}} = e^{-i\frac{\psi}{2}\vec{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos\frac{\psi}{2} - i\sin\frac{\psi}{2}\vec{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \quad (13)$$

où  $\vec{n}$  est un vecteur normalisé à 1 qui est défini par ses angles polaires  $\theta$  et  $\phi$ .

On peut montrer (left as an exercice...) qu'on obtient alors :

$$d\eta(U) = \frac{1}{2} \sin^2\frac{\psi}{2} \sin\theta d\psi d\theta d\phi \quad (14)$$

Dans la suite on ne fera pas usage de cette paramétrisation explicite, j'ai juste montré comment l'écrire pour rendre les choses plus concrètes.

Pour calculer la quantité (12) la remarque clef est de constater que  $\forall U_1 \in SU(2)$  :

$$U_1 \mathbb{E}[\rho] U_1^\dagger = \mathbb{E}[\rho] \quad (15)$$

En effet :

$$U_1 \mathbb{E}[\rho] U_1^\dagger = \int_{U \in SU(2)} d\eta(U) U_1 U \rho U^\dagger U_1^\dagger \quad (16)$$

$$= \int_{U' \in SU(2)} d\eta(U_1^\dagger U') U' \rho U'^\dagger U_1 \quad (17)$$

$\mathbb{E}[\rho]$  est ce qu'on appelle un intertwiner ou opérateur d'entrelacement.

Il est maintenant utile de rappeler la formulation du lemme de Schur :

**Lemma 1.** *Schur.*

*Soit  $G$  un groupe et  $D$  et  $D'$  deux représentations irréductibles dans  $E$  et  $E'$ . Si  $V$  est un opérateur d'entrelacement entre les deux, c'est-à-dire que  $\forall g \in G \ V D(g) = D'(g) V$ , alors ou bien  $V = 0$ , ou bien  $V$  est une bijection et les représentations sont équivalentes.*

*Idée de la preuve* : Remarquons que  $V$  est une application de  $E$  dans  $E'$  dont le noyau et l'image de  $V$  sont préservés respectivement par  $D$  et  $D'$ . En se servant de l'hypothèse d'irréductibilité<sup>1</sup> de  $D$  et  $D'$ , on trouve que  $V$  est forcément une bijection.

Appliqué à notre cas, le lemme de Schur nous dit que comme  $U_1$  est une représentation irréductible de  $SU(2)$  alors  $\mathbb{E}[\rho]$  est forcément proportionnel à l'identité. En utilisant en outre la préservation de la trace, on a que :  $\mathbb{E}[\rho] = \mathbb{I}/2$ . On remarque que toute dépendance avec les conditions initiales a disparu, de même que les termes hors-diagonaux traduisant des superpositions d'états, c'est typiquement ce qu'on attend d'un phénomène de *décohérence*. Géométriquement, c'est l'état au centre de la sphère de Bloch.

Mais ! La théorie permet de dire plus, en outre, elle permet d'avoir accès à tous les moments d'ordre plus élevé que la simple moyenne.

Regardons par exemple ce qui se passe pour les moments d'ordre 2 de la matrice densité. On s'intéresse à la quantité :

$$\rho \otimes \rho \quad (18)$$

i.e on a pris une *réplique* du système. Les éléments de matrice de  $\rho \otimes \rho$  sont les éléments de  $\rho$  au carré. On veut calculer la moyenne de cette quantité, pour cela, on considère :

$$\mathbb{E}[\rho \otimes \rho] = \int d\eta(U) U \otimes U (\rho \otimes \rho) U \otimes U^\dagger \quad (19)$$

Remarquons qu'on agit avec *la même action*  $U$  sur  $\rho$  et sa réplique.

Le point important est que désormais  $U \otimes U$  n'est pas une représentation irréductible de  $SU(2)$ .

Pour voir ça il faut remarquer qu'on peut décomposer  $U \otimes U$  comme la somme direct de représentations agissant sur des objets symétriques ou antisymétriques :

Pour un  $U$  donné, on peut toujours trouvé un système de valeurs propres et vecteurs propres qu'on dénote  $\{|\lambda_i, |\lambda_i\rangle\}$ .

$U \otimes U$  hérite naturellement d'un système de valeurs propres et vecteurs propres de son compare non tensorisé :  $\{|\lambda_i \lambda_j, |\lambda_i, \lambda_j\rangle\}$

On peut constuire des sous-ensembles de cette base qui sont des combinaison symétriques ou anti symétriques de vecteurs propres :

$$|\lambda_{ij}\rangle^S := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\lambda_i \lambda_j\rangle + |\lambda_j \lambda_i\rangle) \quad (20)$$

$$|\lambda_{ij}\rangle^A := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\lambda_i \lambda_j\rangle - |\lambda_j \lambda_i\rangle) \quad (21)$$

Il y a  $(d^2 + d)/2$  éléments symétriques et  $(d^2 - d)/2$  antisymétriques. On peut remarquer alors que les sous-espaces générés par les bases symétriques et antisymétrique sont stables par l'action de  $U \otimes U$ , ainsi, on a trouvé une décomposition bloc-diagonale de  $U \otimes U = U^S \oplus U^A$ . On admettra que les représentations symétriques et antisymétriques sont elles irréductibles.

---

<sup>1</sup>Pour rappel, une façon grossière de définir une représentation irréductible pour une représentation matricielle et de dire qu'il est impossible de la mettre sous forme bloc diagonale, sauf si la taille du bloc est l'espace entier. Une autre façon de le dire est qu'il n'est pas possible de décomposer cette représentation en une somme directe de représentations plus petites.

Concrètement pour notre exemple particulier :

$$\left\{ |0, 0\rangle, |1, 1\rangle, \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle + |1, 0\rangle)}_{:=|0,1\rangle^S} \right\} \rightarrow \text{base symétrique} \quad (22)$$

$$\left\{ \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle - |1, 0\rangle)}_{:=|0,1\rangle^A} \right\} \rightarrow \text{base antisymétrique} \quad (23)$$

Dans cette base  $\rho \otimes \rho$  se réécrit :

$$\begin{pmatrix} \rho^{S,S} & \rho^{S,A} \\ \rho^{A,S} & \rho^{A,A} \end{pmatrix} \quad (24)$$

On se retrouve avec des blocs. Supposons qu'on choisisse un état pur comme "état initial"  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , alors :

$$\begin{aligned} |\psi, \psi\rangle &= \alpha^2|0, 0\rangle + \alpha\beta|0, 1\rangle + \alpha\beta|1, 0\rangle + \beta^2|1, 1\rangle \\ &= \alpha^2|0, 0\rangle + \beta^2|1, 1\rangle + \sqrt{2}\alpha\beta|0, 1\rangle^S \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \rho \otimes \rho &= |\psi, \psi\rangle \langle \psi, \psi| \\ &= \begin{pmatrix} |\alpha|^4 & \alpha^{*2}\beta^2 & \sqrt{2}\alpha^{*2}\alpha\beta & 0 \\ \alpha^2\beta^{*2} & |\beta|^4 & \sqrt{2}\beta^{*2}\alpha\beta & 0 \\ \sqrt{2}\alpha^2\alpha^*\beta^* & \sqrt{2}\beta^2\alpha^*\beta^* & 2|\alpha|^2|\beta|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (26)$$

$\rho \otimes \rho$  a seulement des composantes non nulles dans le secteur symétrique.

On peut maintenant appliquer le lemme de Schur pour  $\rho^{S,S}$ . De la même façon qu'avant on sait que  $\mathbb{E}[\rho^{S,S}]$  est un opérateur d'entrelacement pour la représentation symétrique et est donc proportionnel à l'identité :  $\rho^{S,S} = \mathcal{C}\mathbb{I}$ . Pour trouver le coefficient de proportionnalité  $\mathcal{C}$ , on se sert du fait que la trace est préservé par l'évolution :

$$|\alpha|^4 + |\beta|^4 + 2|\alpha|^2|\beta|^2 = 1 = 3\mathcal{C} \quad (27)$$

On obtient alors :

$$\mathbb{E}[\rho \otimes \rho] = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (28)$$

Remarquons, que même si les fluctuations des termes hors diagonaux de la matrice densité  $|0\rangle\langle 1|, |1\rangle\langle 0|$  sont nulles en moyenne, ça n'est pas le cas pour leurs *fluctuations*. En effet, cela se voit par la contribution non nulle du terme  $|0, 1\rangle^S\langle 0, 1|^S$  dans  $\rho \otimes \rho$ . Ainsi, il y a des fluctuations de *coherence quantique* même dans l'état stationnaire décrit par la mesure invariante.

Remarquons également qu'ici, au contraire de la moyenne, une information est retenue de l'état initiale ; le poids relatif dans le secteur symétrique et antisymétrique. On peut donc avoir une information sur l'état initiale en observant la structure des fluctuations. Cette affirmation se généralise également pour les moments élevés, ce qu'on ne montrera pas ici. En gros, plus on monte en ordre, plus la décomposition en représentation irréductibles de  $U \otimes \dots \otimes U$  devient complexe et plus on retient d'information sur l'état initial  $\rho \otimes \dots \otimes \rho$ .

### 3 Symétries supplémentaires

Nous finissons ces notes en montrant que ce formalisme permet également de tenir en compte d'éventuelles symétries du problèmes.

Supposons par exemple que notre système à deux niveaux représente des états de spin up ou down et que la nature du problème fait que la mesure invariante doit préserver la magnétisation totale  $\sigma_z$ .

On impose cette condition simplement en demandant que, les unitaire  $U$  intervenant dans la moyenne doivent respecter la condition :

$$[U, \sigma_z] = 0 \quad (29)$$

En d'autres termes, il existe une base propre commune dans laquelle  $U$  et  $\sigma_z$  sont diagonales. Dans la base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , un élément générique  $U$  s'écrit alors

$$\begin{pmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & e^{i\psi} \end{pmatrix} \quad (30)$$

et la moyenne de  $\rho$  se fait en intégrant sur les angles :

$$\mathbb{E}[\rho] = \int \int d\phi d\theta U \rho U^\dagger \quad (31)$$

Pour un état pur  $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ , on a alors :

$$\mathbb{E}[\rho] = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 \\ 0 & 1 - |\alpha|^2 \end{pmatrix} \quad (32)$$

et on trouve comme prévue que la magnétisation moyenne est inchangée et vaut  $2|\alpha|^2 - 1$ . En revanche les autres observables  $\sigma_x$  et  $\sigma_y$  ont une valeur moyenne nulle.

De la même façon, on peut calculer les fluctuations de  $\rho$ . Pour cela on considère  $U \otimes U$  qu'on doit décomposer selon les secteurs de  $\sigma_z$  :

$$U \otimes U = (U^\theta \oplus U^\psi) \otimes (U^\theta \oplus U^\psi) \quad (33)$$

avec  $U^\theta = e^{i\theta}$ ,  $U^\psi = e^{i\psi}$ . On vérifie facilement que les éléments invariants par cette action sont les suivants :

$$\{|0,0\rangle \langle 0,0|, |0,1\rangle \langle 0,1|, |1,0\rangle \langle 1,0|, |0,1\rangle \langle 1,0|, |1,0\rangle \langle 0,1|, |1,1\rangle \langle 1,1|\} \quad (34)$$

Dans cette base, la matrice densité moyenne s'écrit :

$$\mathbb{E}[\rho \otimes \rho] = \begin{pmatrix} |\alpha|^4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |\alpha|^2|\beta|^2 & |\alpha|^2|\beta|^2 & 0 \\ 0 & |\alpha|^2|\beta|^2 & |\alpha|^2|\beta|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |\beta|^4 \end{pmatrix} \quad (35)$$

On voit que ce résultat contraste fortement avec le cas sans conservation.

### 4 Limite thermodynamique, ensemble microcanonique, etc.

Il est possible de généraliser la discussion précédente pour un système avec un grand nombre de degrés de liberté, c'est-à-dire de passer à la limite *thermodynamique*.

Cette limite est discutée en détail ici :

<https://scipost.org/SciPostPhys.9.1.004>