Examen de physique quantique et statistique, le 6 Novembre 2012

PHELMA PNS 2A

Matrice Densité

Jusque là nous avons généralement supposé en cours que les états quantiques étaient parfaitement bien préparés, ce qui bien sûr n'impliquait pas que l'issue de la mesure d'une certaine quantité physique ayant pour observable $\hat{A}$ était certaine. L'introduction du formalisme de la matrice densité permet de faire le lien vers des systèmes où l'état quantique initial est incomplètement connu. Cet outil très important - formalisé par von Neumann vers 1930 - relie formellement la mécanique quantique avec la physique statistique.

On considère un système quantique dont les états sont vecteurs d'un espace hermitien $\mathcal{E}$, que nous supposerons de dimension finie (même si les résultats trouvés restent valables en dimension infinie). Tous les *kets* définis ci-après sont des vecteurs de $\mathcal{E}$.

Soient $\hat{A}$ une observable quantique quelconque, $\hat{I}$ l'opérateur identité et $\hat{H}$ l'opérateur hamiltonien de $\mathcal{E}$. Si f est une fonction suffisamment continue et dérivable d'une variable x, $f(\hat{A})$ est aussi un opérateur de $\mathcal{E}$. S'il existe $\hat{B}$ tel que $\hat{A} = e^{\hat{B}}$ alors on notera $\hat{B} = \ln(\hat{A})$.

Tr désigne la trace sur $\mathcal{E}$, dont les principales propriétés sont rappelées en fin d'énoncé.

On utilisera la définition de l'entropie au sens de Shannon dont on rappelle l'expression $S = -k_B \sum_i p_i \ln(p_i)$, où les p_i sont les probabilités d'occupation des différents microétats dénombrés par i, avec $\sum_i p_i = 1$.

I Etats purs

On suppose un système quantique qui a été préparé initialement dans un état normé pur $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$,

1.) Expliquez le sens physique de la quantité $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$.

2.) On définit la *matrice densité* (ou opérateur densité) de cet état

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Montrez que $\langle A \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mathrm{A}})$.

3.) Montrez que $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1$, que $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ et que $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$.

II Etats mixtes

Supposons maintenant que l'on ne sache pas exactement dans quel état quantique le système a été préparé initialement. On sait seulement qu'il a une probabilité p_i d'être initialement dans l'état $|\psi_i\rangle$, avec $\sum_i p_i = 1$ et $0 \leq p_i \leq 1$. Les différents $|\psi_i\rangle$ forment une base, sont normés mais pas forcément orthogonaux. Notez que cette incertitude est d'origine statistique et pas quantique.

4.) Justifiez que la valeur moyenne de la mesure statistique de $\hat{A}$, que l'on notera toujours $\langle\hat{A}\rangle$ est donnée par $\langle\hat{A}\rangle = \sum_i p_i\langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle$.

5.) On définit alors la matrice densité du système par $\hat{\rho} = \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$. Donnez une représentation matricielle de $\hat{\rho}$. Montrez que $\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mathrm{A}})$ est toujours valable.

6.) Montrez que $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1$, $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$. A l'aide d'un exemple montrez que de manière générale $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$.

7.) A l'aide de l'équation de Schrodinger démontrez l'équation de *Liouville - von Neumann*:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}].$$

La comparer à l'équation de l'évolution temporelle d'une moyenne quantique vue en cours.

8.) La notation $\ln(\hat{\rho})$ pose un problème car elle n'est bien pas bien définie lorsqu'un des p_i tend vers 0. Montrez par un passage à la limite que $\hat{\rho}\ln(\hat{\rho})$ reste cependant bien défini dans cette limite. Montrez que $S = -k_B\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\ln(\hat{\rho}))$.

III Ensemble de spins et loi de Curie

9.) Soit un spin 1/2 non polarisé, c'est-à-dire qu'il est de manière équiprobable dans l'état $|+\rangle$ ou $|-\rangle$. Montrez que $\hat{\rho} = \hat{I}/2$.

10.) On considère un système de spin 1/2 qui est dans l'état $|+\rangle$ avec une probabilité $0 \leq \alpha \leq 1$. Exprimez son entropie en fonction de α. Tracer qualitativement $S(\alpha)$ et exprimer sa valeur maximale.

On considère désormais un ensemble de N spins 1/2 paramagnétiques discernables. C'est donc un système bien décrit par l'ensemble canonique.

11.) On rappelle qu'à l'équilibre thermique, la population d'un état stationnaire i d'énergie ϵ_i est $p_i = \frac{1}{Z}\exp(-\beta\epsilon_\mathrm{i})$, où $\beta = 1/k_BT$ et Z est la fonction de partition. En déduire que

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\exp(-\beta\hat{H}),$$

puis que

$$Z = \mathrm{Tr}\left(\exp(-\beta\hat{\mathrm{H}})\right).$$

12.) En présence d'un champ magnétique (uniforme, selon l'axe z et de norme B), on a $\hat{H} = -\frac{\gamma}{2} B\,\hat{\sigma}_z$, où $\gamma/2$ est le moment magnétique d'un spin et $\hat{\sigma}_z$ est la notation standard de la matrice de Pauli selon z.

Montrez que l'aimantation s'écrit

$$M_z = \frac{\gamma N}{2Z} \mathrm{Tr}\left(\exp(-\beta \hat{\mathrm{H}})\,\hat{\sigma}_{\mathrm{z}}\right),$$

où on calculera explicitement Z.

13.) Effectuez un développement limité valable à haute température de l'expression ci-dessus et déduisez-en la susceptibilité au premier ordre en β du système.

Trace

Définition : Soit $\{|n\rangle\}_n$ une base orthonormée de $\mathcal{E}$ et $\hat{X}$ un opérateur.

$$\mathrm{Tr}(\hat{\mathrm{X}}) = \sum_{\mathrm{n}} \langle \mathrm{n}|\hat{\mathrm{X}}|\mathrm{n}\rangle.$$

- La valeur de la trace ne dépend pas de la base orthonormée choisie.
- $\mathrm{Tr}(\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}}) = \mathrm{Tr}(\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{A}})$.
- $\mathrm{Tr}(\hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}}) = \mathrm{Tr}(\hat{\mathrm{A}}) + \mathrm{Tr}(\hat{\mathrm{B}})$.