

## Mémoire

**Auteur** : Debecker, Baptiste

**Promoteur(s)** : Martin, John

**Faculté** : Faculté des Sciences

**Diplôme** : Master en sciences physiques, à finalité approfondie

**Année académique** : 2020-2021

**URI/URL** : <http://hdl.handle.net/2268.2/12741>

---

### *Avertissement à l'attention des usagers :*

*Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.*

*Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.*

---

UNIVERSITÉ DE LIÈGE



---

# Évolution stochastique de systèmes quantiques ouverts markoviens

---

*Auteur:* Baptiste DEBECKER  
*Promoteur:* Prof. John MARTIN

*Mémoire présenté dans le cadre  
de l'obtention du grade de  
Master en sciences physiques,  
à finalité approfondie.*

Année académique 2020-2021



# Remerciements

*Tout d'abord, j'aimerais remercier mon promoteur, le Professeur John Martin, pour ses conseils avisés, sa grande disponibilité et sa rigueur scientifique. Je souhaite également remercier le Docteur François Damanet pour ses remarques pertinentes.*

*Je tiens également à remercier les Professeurs Peter Schlagheck, Nicolas Vandewalle et Jean-Yves Raty d'avoir accepté de constituer le comité de lecture de ce mémoire. J'espère que vous prendrez plaisir à me lire.*

*Enfin, merci à ma famille et à mes amis pour leur soutien indéfectible tout au long de mon cursus universitaire.*



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>7</b>
<b>1 Opérateur densité</b>	<b>9</b>
1.1 Introduction . . . . .	9
1.2 Définition et propriétés . . . . .	9
1.3 Opérateur densité réduit . . . . .	10
1.4 Systèmes ouverts et opérateur densité . . . . .	11
<b>2 Éléments de calcul stochastique</b>	<b>13</b>
2.1 Processus stochastiques . . . . .	13
2.2 Processus stochastiques markoviens . . . . .	13
2.3 Mouvement brownien . . . . .	14
2.3.1 Introduction . . . . .	14
2.3.2 Définition et propriétés . . . . .	14
2.4 Calcul d'Itô . . . . .	15
2.5 Retour sur le mouvement brownien . . . . .	17
2.6 Les différentielles stochastiques ponctuelles . . . . .	18
<b>3 Systèmes quantiques ouverts markoviens</b>	<b>19</b>
3.1 Systèmes quantiques ouverts . . . . .	19
3.2 Forme standard de l'équation maîtresse . . . . .	20
3.2.1 Concepts préliminaires . . . . .	20
3.2.2 Forme standard de l'équation maîtresse . . . . .	24
3.2.3 Commentaires . . . . .	27
3.3 Approche microscopique . . . . .	28
3.3.1 Schéma d'interaction . . . . .	28
3.3.2 Dérivation microscopique de l'équation de Lindblad . . . . .	29
3.3.3 Conclusion et hamiltonien de Lamb shift . . . . .	33
3.3.4 Fonctions de corrélation et validité des approximations . . . . .	34
3.4 Méthodes stochastiques de résolution de l'équation maîtresse . . . . .	39
3.4.1 Motivations . . . . .	39
3.4.2 Objectif . . . . .	40
3.4.3 Unravelling . . . . .	40
3.4.4 Diffusion de l'état quantique - QSD . . . . .	40
3.4.5 Simulations . . . . .	46
3.4.6 Éléments de la théorie de la mesure . . . . .	54
3.4.7 Méthode des sauts quantiques - QJA . . . . .	60
3.4.8 Simulations . . . . .	64
3.4.9 Équivalence entre les démêlages QSD et QJA . . . . .	69
3.4.10 Unravelling linéaire . . . . .	69
<b>Conclusion</b>	<b>71</b>
<b>A Codes du chapitre deux</b>	<b>73</b>
<b>B Codes du chapitre trois</b>	<b>75</b>
B.1 Méthode QSD . . . . .	75
B.1.1 Exemples: mesure de la composante $z$ du spin d'un atome et émission spontanée.	75
B.2 Méthode QJA . . . . .	79
B.2.1 Exemple: mesure de la composante $z$ du spin d'un atome et émission spontanée.	79
B.3 Code Mathematica . . . . .	81



# Introduction

## Objectifs et motivations

En mécanique quantique, l'état d'un système *isolé* est décrit à tout instant  $t$  par un vecteur d'état, parfois appelé *ket* et souvent noté  $|\psi(t)\rangle$ , appartenant à un espace de Hilbert formé sur le corps des complexes. L'évolution temporelle d'un tel vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  est gouvernée par l'équation de Schrödinger. Ces deux assertions forment les deux premiers postulats de la mécanique quantique [2].

Le premier objectif de ce mémoire est de présenter une généralisation de l'équation de Schrödinger pour des systèmes *ouverts*, *i.e.* en interaction avec leur environnement. L'outil adapté à la description de ces systèmes n'est pas un vecteur appartenant à un espace de Hilbert, mais plutôt un *opérateur* agissant sur un espace de Hilbert. Cet opérateur porte le nom d'*opérateur densité*. L'évolution de l'opérateur densité est décrite par une *équation maîtresse*, qui se veut être une généralisation de l'équation de Schrödinger. L'équation maîtresse appropriée à la description des systèmes ouverts sans mémoire est connue sous le nom d'*équation maîtresse de Lindblad* et les systèmes dépourvus de mémoire sont qualifiés de *markoviens*.

Le second objectif de ce mémoire consiste à présenter deux méthodes de résolution de l'équation maîtresse de Lindblad. A nouveau, il convient d'introduire un nouvel outil: le calcul différentiel stochastique. En partant de l'équation maîtresse de Lindblad, il est possible de retourner à une description vectorielle de l'état d'un système ouvert. Le coût de cette transition est la perte de déterminisme des équations. Autrement dit, les équations ainsi obtenues, appelées *démêlages* ou *unravellings*<sup>1</sup> de l'équation maîtresse, sont des équations différentielles stochastiques.

Avant de passer à la description précise du contenu de ce mémoire, il est essentiel de motiver l'étude des systèmes ouverts et des démêlages. D'une part, d'un point de vue *fondamental*, l'étude des systèmes ouverts est primordiale car aucun système physique n'est parfaitement isolé<sup>2</sup>. En effet, tout système a interagi ou est en interaction avec un autre système. Par ailleurs, pour collecter des informations sur un système physique, il faut nécessairement le faire interagir avec un autre système (l'appareil de mesure). L'étude des systèmes ouverts fournit ainsi un cadre naturel à *la théorie de la mesure en mécanique quantique*. D'autre part, d'un point de vue plus *appliqué*, les systèmes ouverts jouent un rôle central dans la *cryptographie quantique* [15], la *communication quantique* [25], l'élaboration d'*ordinateurs quantiques* [33] et, plus généralement, dans la *théorie de l'information quantique* [27]. Il n'est pas déraisonnable de penser que ces domaines de recherche actifs puissent conduire à une pléthore d'applications industrielles. En effet, rappelons que l'électromagnétisme est une théorie du 19<sup>ème</sup> siècle dont les applications industrielles majeures ont bouleversé le 20<sup>ème</sup> siècle. De façon analogue, la mécanique quantique est une théorie du siècle précédent dont les applications *intrinsèquement* quantiques comme, par exemple, la cryptographie quantique, n'ont été envisagées que récemment. Certains auteurs parlent de mine d'or dont l'extraction n'est qu'à son commencement [15].

Quant aux démêlages, ils constituent un outil d'optimisation numérique puissant permettant de résoudre numériquement des équations maîtresses complexes. Ils contribuent donc grandement à l'étude des systèmes ouverts. En outre, les techniques expérimentales modernes, comme les pièges à ions, permettent d'observer une réalisation *unique* d'un système à une particule [21]. Or, la mécanique quantique est une théorie *ensembliste* en ce sens qu'elle fournit des prédictions sur les valeurs moyennes, ou *espérances*, d'observables. Dès lors, un problème *conceptuel* survient: comment prédire une réalisation unique d'un tel système ? Nous verrons dans ce mémoire que les démêlages permettent de décrire *qualitativement* de tels expériences. Enfin, les démêlages sont également à la base de la construction de *théories quantiques alternatives* [34, 40, 29]. Ces trois points forment les trois principales motivations de l'étude des unravellings. Ils sont discutés en détail dans la section 3.4.1.

---

<sup>1</sup>Ces deux termes sont utilisés comme des synonymes dans ce manuscrit.

<sup>2</sup>A l'exception de l'Univers tout entier.

## Plan du mémoire

Le présent mémoire est une synthèse originale de l'évolution stochastique de systèmes quantiques ouverts markoviens. Il combine l'utilisation de concepts avancés d'analyse stochastique et de mécanique quantique.

Les deux premiers chapitres doivent être considérés comme des prérequis indispensables à la bonne compréhension du chapitre trois. Ils contiennent peu de démonstrations et les concepts sont introduits de façon pragmatique. Le premier chapitre définit les notions d'opérateurs densité et d'opérateurs densité réduits ainsi que leurs diverses propriétés. L'opérateur densité est introduit par analogie avec la notion classique de densité de probabilité. Le deuxième chapitre établit les règles du calcul stochastique en insistant sur les différences entre l'analyse traditionnelle et le calcul stochastique. Les notions introduites sont illustrées sur un exemple: le mouvement brownien. Le deuxième chapitre se termine par l'introduction de la notion de *différentielle ponctuelle*.

Le chapitre trois constitue le coeur de ce mémoire. Il se compose de deux parties. Dans la première partie, nous démontrons par des arguments essentiellement *mathématiques* la forme générale de l'équation de Lindblad. Ensuite, nous clarifions la signification *physique* de l'équation de Lindblad en la démontrant par l'étude *microscopique* de la dynamique des systèmes quantiques ouverts markoviens. La seconde partie présente deux méthodes stochastiques de résolution de l'équation de Lindblad appelées *méthode des sauts quantiques* et *diffusion de l'état quantique*. Pour chaque méthode, l'équation différentielle stochastique découlant de l'équation maîtresse est démontrée. Les propriétés des solutions de ces équations, appelées *trajectoires quantiques*, sont illustrées numériquement sur plusieurs exemples de systèmes à deux niveaux. Un soin particulier est accordé à l'établissement de l'équivalence entre les prédictions de l'équation de Lindblad et les prédictions des équations différentielles stochastiques. Notons qu'une troisième démonstration de l'équation de Lindblad survient naturellement dans la preuve de l'équation de la méthode des sauts quantiques.

# Chapitre 1

## Opérateur densité

Dans ce chapitre, nous introduisons un objet central de la modélisation des systèmes quantiques ouverts: l'opérateur densité. Nous faisons le lien avec la mécanique classique et montrons pourquoi il est approprié de décrire un système en interaction avec son environnement, *i.e.* un système ouvert, à l'aide d'un tel opérateur. A cette fin, nous introduisons les concepts de trace partielle et d'opérateur densité réduit.

### 1.1 Introduction

Classiquement, la transition de la mécanique classique à la mécanique classique statistique se fait *via* l'introduction de la densité de probabilité classique  $\rho(q, p, t)$  exprimée en termes des variables généralisées  $q$  et  $p$  et dès lors définie sur l'espace des phases. La conservation de la probabilité couplée aux équations de Hamilton donne alors l'équation de Liouville [2]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}, \quad (1.1)$$

avec  $H$  l'hamiltonien du système et  $\{\cdot, \cdot\}$  représente le crochet de Poisson<sup>1</sup>. Par ailleurs, il est bien connu que le remplacement  $\{\cdot, \cdot\} \rightarrow (i\hbar)^{-1}[\cdot, \cdot]$  permet d'obtenir l'équivalent quantique d'équations classiques. En appliquant ce remplacement à l'équation de Liouville, il vient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = [H, \rho], \quad (1.2)$$

pour un certain opérateur  $\rho$ , qui se veut être la généralisation quantique de la densité de probabilité classique. Pour cette raison, cet opérateur s'appelle *l'opérateur densité* [2].

### 1.2 Définition et propriétés

Définissons à présent de façon plus formelle cet opérateur et étudions ses principales propriétés.

Considérons un certain système physique dont nous ne connaissons pas l'état mais nous savons néanmoins qu'il a une probabilité  $p_i$  d'être dans l'état  $|\psi_i\rangle$  pour tout  $i \in I$ . Il est naturel d'exiger que  $\sum_{i \in I} p_i = 1$ , de sorte que l'ensemble  $\{\{p_i\}, |\psi_i\rangle\}$  décrive complètement le système physique. Un tel ensemble  $\{\{p_i\}, |\psi_i\rangle\}$  définit un *mélange statistique d'états*. En pratique, ces mélanges statistiques d'états décrivent une vaste gamme de systèmes [2]. Par exemple, si l'on étudie une source non polarisée de photons, chaque polarisation est équiprobable et il paraît commode de décrire notre système à l'aide de probabilités et de vecteurs kets associés.

L'opérateur densité  $\rho$  associé au mélange statistique d'états  $\{\{p_i\}, |\psi_i\rangle\}$  est défini par

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (1.3)$$

avec  $|\psi_i\rangle \langle \psi_i|$  le projecteur sur le ket  $|\psi_i\rangle$ . Si tous les coefficients  $p_i$  sont nuls sauf un (disons  $p_k$  pour fixer les idées), le système est décrit par l'état pur  $\rho = |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$ . Un état pur n'est ainsi qu'un cas

---

<sup>1</sup>Pour rappel, si  $P$ , et  $Q$  sont deux fonctions assez régulières définies sur l'espace des phases considéré, le crochet de Poisson est défini par:

$$\{P, Q\} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial P}{\partial q_i} \frac{\partial Q}{\partial p_i} - \frac{\partial P}{\partial p_i} \frac{\partial Q}{\partial q_i} \right]$$

avec  $N$  le nombre de coordonnées généralisées.

particulier d'un mélange statistique d'états. Pour compléter l'exemple ci-dessus, il est clair qu'un cas pur émerge si l'on étudie un flux de photons parfaitement polarisés.

L'opérateur densité jouit de propriétés intéressantes. Nous énonçons ses principales propriétés ci-dessous [8].

1.  $\rho$  est défini positif, *i.e.*  $\rho$  est hermitien et  $\langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0 \quad \forall |\phi\rangle$ .
2.  $\rho$  est de trace unité.
3. Si les états  $|\psi_i\rangle$  évoluent suivant l'équation de Schrödinger, alors

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H, \rho], \quad (1.4)$$

avec  $H$  l'hamiltonien du système considéré.

4. La valeur moyenne ou *espérance quantique* d'une observable<sup>2</sup>  $A$ , notée  $\langle A \rangle$ , est donnée par

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(A\rho). \quad (1.5)$$

5.  $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$ , l'égalité ayant lieu si et seulement si  $\rho$  décrit un état pur, auquel cas  $\rho$  est idempotent, *i.e.*  $\rho^2 = \rho$ .

Ces propriétés se démontrent facilement à l'aide de la définition de l'opérateur densité et des propriétés des projecteurs. Donnons quelques commentaires. Les propriétés trois et quatre sont fondamentales en ce sens qu'elles donnent l'évolution temporelle de  $\rho$  (propriété 3) et un moyen de prédire des résultats (propriété 4). Il est immédiat de remarquer que l'équation d'évolution de l'opérateur densité (1.4) a bien la forme annoncée à la section précédente et constitue dès lors une généralisation de l'équation de Liouville classique. Pour cette raison, cette relation est souvent appelée *équation de Liouville quantique* ou encore *équation de Liouville-von Neumann* [2]. Par ailleurs, l'équation de Schrödinger est équivalente à l'équation (1.4) dans le cas pur; l'équation de Liouville-von Neumann n'est rien d'autre qu'une généralisation ou extension naturelle de l'équation de Schrödinger aux mélanges statistiques d'états. Quant à la propriété 5, elle peut être vue comme un *critère* permettant de déterminer si l'opérateur  $\rho$  correspond à un état pur ou à un mélange statistique d'états<sup>3</sup>. Finalement, il est possible de montrer [8] que les propriétés 1 et 2 constituent en réalité la définition la plus générale d'un opérateur densité. Il vient dès lors la définition suivante.

**Définition 1** *Un opérateur densité est un opérateur rho positif et de trace unité.*

Autrement dit, à tout opérateur défini positif et de trace unité, on peut associer un ensemble  $\{p_k, |\psi_k\rangle\}$  avec  $p_k$  des nombres positifs et tels que  $\sum_k p_k = 1$  et  $|\psi_k\rangle$  des fonctions d'ondes décrivant potentiellement un système de sorte que

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (1.6)$$

Notons finalement qu'un opérateur densité est univoquement défini par la donnée des  $\{p_k, |\psi_k\rangle\}$ . Cependant, deux ensembles  $\{p_k, |\psi_k\rangle\}$  et  $\{p'_k, |\psi'_k\rangle\}$  différents peuvent donner naissance au même opérateur densité [8]. Cette ambiguïté apparente n'est en rien problématique. En effet, si les deux ensembles précités décrivent *a priori* deux systèmes quantiques différents, ils donnent en tout point des prédictions identiques (en vertu de (1.5)) et peuvent donc, pour cette raison, être considérés comme strictement identiques. Nous dirons dès lors que ces deux systèmes représentent le même état quantique  $\rho$ .

### 1.3 Opérateur densité réduit

Cette section vise à introduire l'objet central de la description des systèmes quantiques ouverts: l'opérateur densité réduit. Soit un système  $C = A + B$  composé de deux parties  $A$  et  $B$ . C'est un fait bien connu que l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_C$  du système global  $C$  est donné par le produit tensoriel

$$\mathcal{H}_C = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (1.7)$$

De plus,  $\mathcal{H}_C$  est sous-tendu par la base

$$\{|\phi_i^A\rangle \otimes |\phi_j^B\rangle\}, \quad (1.8)$$

<sup>2</sup>Rappelons qu'une observable est un opérateur hermitien.

<sup>3</sup>La propriété 5 permet également d'introduire la notion de *sphère de Bloch* (voir chapitre 3).

si  $\{|\phi_i^A\rangle\}$  et  $\{|\phi_i^B\rangle\}$  sont respectivement des bases de  $\mathcal{H}_A$  et  $\mathcal{H}_B$ . Définissons à présent un opérateur  $A$  agissant uniquement sur  $\mathcal{H}_A$ . Son extension au système global  $C = A + B$ , notée  $A_C$ , s'écrit

$$A_C = A \otimes I_B, \quad (1.9)$$

avec  $I_B$  l'opérateur identité défini sur l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_B$ <sup>4</sup>. La valeur moyenne de l'opérateur  $A$  s'écrit successivement

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \text{Tr}(\rho A_C) \\ &= \sum_{ij} \langle \phi_i^A \otimes \phi_j^B | \rho A_C | \phi_i^A \otimes \phi_j^B \rangle \\ &= \sum_{ijj'} \langle \phi_i^A \otimes \phi_j^B | \rho | \phi_{i'}^A \otimes \phi_{j'}^B \rangle \langle \phi_{i'}^A \otimes \phi_{j'}^B | A_C | \phi_i^A \otimes \phi_j^B \rangle \\ &= \sum_{ijj'} \langle \phi_i^A \otimes \phi_j^B | \rho | \phi_{i'}^A \otimes \phi_{j'}^B \rangle \langle \phi_{i'}^A | A | \phi_i^A \rangle \\ &= \sum_{ii'} \langle \phi_i^A | \rho_A | \phi_{i'}^A \rangle \langle \phi_{i'}^A | A | \phi_i^A \rangle \\ &= \text{Tr}_A(\rho_A A) \end{aligned} \quad (1.10)$$

avec  $\rho$  l'opérateur densité du système global  $C$  et  $\rho_A$  l'opérateur densité réduit<sup>5</sup> défini par

$$\rho_A = \text{Tr}_B(\rho) = \sum_i (I_A \otimes \langle \phi_i^B |) \rho (I_A \otimes |\phi_i^B\rangle). \quad (1.11)$$

Ses éléments de matrices sont alors donnés par

$$\begin{aligned} (\rho_A)_{jk} &= \langle \phi_j^A | \rho_A | \phi_k^A \rangle \\ &= \sum_i \langle \phi_j^A \otimes \phi_i^B | \rho | \phi_k^A \otimes \phi_i^B \rangle. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Il est important à ce stade de commenter les résultats obtenus. L'opération mathématique  $\text{Tr}_B$  est appelée *trace partielle* parce que sa définition, donnée par (1.11), n'est rien d'autre qu'une trace au sens usuel du terme sur le sous-système  $B$  uniquement. Notons cependant que la trace partielle  $\text{Tr}_B$  appliquée à l'opérateur densité  $\rho$  rend un *opérateur*, l'opérateur de densité réduit, défini sur le sous-système  $A$  à la différence de la trace  $\text{Tr}$  qui rend un nombre. Il est évidemment clair qu'un raisonnement analogue à celui qui a été tenu dans cette section mène à l'introduction d'un opérateur de densité réduit  $\rho_B$  défini sur le sous-système  $B$  et défini par ses éléments de matrice

$$\begin{aligned} (\rho_B)_{jk} &= \langle \phi_j^B | \rho_B | \phi_k^B \rangle \\ &= \sum_i \langle \phi_i^A \otimes \phi_j^B | \rho | \phi_i^A \otimes \phi_k^B \rangle. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Revenons à présent sur le développement (1.10). Nous avons obtenu la relation

$$\langle A \rangle = \text{Tr}_A(\rho_A A). \quad (1.14)$$

Cette équation exhibe l'importance de l'opérateur densité réduit. En effet, si l'on admet que le système global est décrit par un opérateur densité  $\rho$  connu, alors il est possible de prédire la valeur moyenne d'observables concernant le système  $A$  sans connaître la forme explicite de l'état  $\rho_B$  du système  $B$ . Autrement dit, tout se passe comme si les deux systèmes étaient dans un état séparé même lorsque ceux-ci sont intriqués.

## 1.4 Systèmes ouverts et opérateur densité

Dans l'étude des systèmes ouverts, l'opérateur densité joue un rôle majeur. Anticipons la suite et définissons un tel système. De façon générale, un système ouvert  $S$  est un système couplé à un environnement  $E$ . En vertu de la section précédente, la valeur moyenne d'une observable  $A$ , définie sur  $S$ , est donnée par

<sup>4</sup>Notons que cette notation est maintenue dans la suite des notes. L'opérateur  $I_{\mathcal{H}}$  est l'opérateur identité défini sur l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}$ .

<sup>5</sup>Il est immédiat de vérifier que l'opérateur densité réduit est bien un opérateur densité.

$$\langle A \rangle = \text{Tr}_S(\rho_S A). \quad (1.15)$$

Par conséquent, il est clair que la quantité d'intérêt est l'opérateur de densité réduit  $\rho_S$ , dont l'équation d'évolution *exacte* est donnée par la trace partielle de l'équation de Liouville-von Neumann (1.4)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_S = \text{Tr}_E([H, \rho]). \quad (1.16)$$

Ce mémoire présente des méthodes d'*approximation* permettant de résoudre l'équation *exacte* ci-dessus.

# Chapitre 2

## Éléments de calcul stochastique

Le calcul stochastique est un outil indispensable à la bonne compréhension des méthodes stochastiques de résolution de l'équation maîtresse. Ce chapitre a pour but d'introduire de façon *pragmatique* les équations différentielles stochastiques et, en particulier, le *calcul d'Itô* et la notion de *différentielle stochastique ponctuelle*. Pour une présentation générale et plus complète de la théorie, nous renvoyons le lecteur vers les références [9] ou [8] sur lesquelles ce chapitre s'appuie.

### 2.1 Processus stochastiques

Rappelons quelques généralités sur les processus stochastiques. Nous commençons par définir de tels processus de la façon la plus générale.

**Définition 2** Soit  $T$  un sous-ensemble de  $[0, +\infty[$ . Un processus stochastique est une famille de variables aléatoires  $\{X(t)\}_{t \in T}$  indexée par  $T$ .

Selon que le sous-ensemble  $T$  est discret ou continu, on parle de processus stochastique discret ou continu. Dans la suite, nous considérons uniquement des processus stochastiques continus. En physique, la variable  $t$  représente le plus souvent le temps et l'intervalle  $T$  est dès lors un laps de temps. Autrement dit, un processus stochastique n'est rien d'autre qu'un ensemble de variables aléatoires dépendantes du temps.

Rappelons qu'une variable aléatoire est la donnée d'une application

$$X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \quad (2.1)$$

qui à tout événement  $\omega$  appartenant à  $\Omega^1$  associe un nombre réel  $x = X(\omega)$ . Ainsi, un processus stochastique est par définition une application

$$X : \Omega \times T \rightarrow \mathbb{R} \quad (2.2)$$

qui à tout événement  $\omega$  et à tout temps  $t$  associe le nombre réel  $x = X(\omega, t)$ . Par conséquent, nous utiliserons indifféremment les notations  $\{X(t)\}$  et  $X(t)$  pour désigner un processus stochastique.

A chaque événement  $\omega$  fixé, le processus stochastique définit la fonction

$$f_\omega(t) : T \rightarrow \mathbb{R}, \quad t \mapsto X(\omega, t) \quad (2.3)$$

appelée *trajectoire du processus stochastique*. Ces trajectoires jouent un rôle important dans la suite.

### 2.2 Processus stochastiques markoviens

Pour définir un processus stochastique, il suffit en principe de définir une suite de variables aléatoires dépendantes du temps, *i.e.* il suffit de donner une application de la forme (2.2). En pratique, cependant, il est souvent plus commode d'étudier, pour un ensemble discret de temps  $t_i$ , la corrélation entre les différentes variables aléatoires  $X(t_i)$ . Une telle description ne fait donc pas intervenir directement des applications du type (2.2) mais plutôt une famille de densités de probabilité jointes

$$p(B_1, t_1; B_2, t_2; \dots; B_m, t_m) = P(X(t_1) \in B_1, X(t_2) \in B_2, \dots, X(t_m) \in B_m) \quad (2.4)$$

avec  $X(t)$  le processus stochastique en question et  $\{B_i\}$  des sous-ensembles<sup>2</sup> de  $\mathbb{R}$ . La densité de probabilité  $p(B_1, t_1; B_2, t_2; \dots; B_m, t_m)$  représente la probabilité  $P(X(t_1) \in B_1, X(t_2) \in B_2, \dots, X(t_m) \in B_m)$

<sup>1</sup>Comme toujours en théorie des probabilités,  $\Omega$  est une  $\sigma$ -algèbre.

<sup>2</sup>Les sous-ensembles en question sont en toute généralité des boréliens ou ensembles de Borel [8].

que le processus  $X(t)$  fournisse une valeur dans  $B_1$  au temps  $t_1$ , une valeur dans  $B_2$  au temps  $t_2$ , ... et une valeur dans  $B_m$  au temps  $t_m$ . L'ensemble des densités de probabilité jointes  $p(B_1, t_1; B_2, t_2; \dots; B_m, t_m)$  pour tout  $m = 0, 1, 2, \dots$ , pour tous les ensembles  $B_i$  et tous les instants  $t_j$  est appelé *famille ou hiérarchie de densités de probabilité jointes du processus stochastique*  $\{X(t)\}$ .

Étant donné un processus stochastique  $\{X(t)\}$ , il est immédiat de calculer sa famille de densités de probabilité jointes. Inversement, peut-on toujours associer à une telle famille un processus stochastique ? La réponse est affirmative et constitue un théorème, souvent appelé *théorème de Kolmogorov* [8]. Par ailleurs, plusieurs processus stochastiques différents peuvent être associés à une même famille de densités de probabilité jointes. Cette ambiguïté est toutefois rapidement levée car les densités de probabilité jointes donnent de façon univoque une probabilité finie pour tout ensemble fini (et donc expérimental) de variables aléatoires indexées par le temps.

Nous sommes à présent en mesure de définir un *processus stochastique markovien*. L'idée est en réalité assez simple: un processus markovien est un processus stochastique qui n'est pas tributaire de son passé. Autrement dit, c'est un processus sans mémoire, ou plutôt à mémoire courte. La description mathématique de ces processus est aisée. En effet, par définition, un processus stochastique  $\{X(t)\}$  est markovien si

$$p(X(t) = x | X(t_m) = x_m, \dots, X(t_1) = x_1) = p(X(t) = x | X(t_m) = x_m) \quad (2.5)$$

pour tout  $t_1 \leq t_2 \leq t_3 \dots \leq t_m \leq t$ . Autrement dit, la densité de probabilité conditionnelle  $p(X(t) = x | X(t_m) = x_m, \dots, X(t_1) = x_1)$  d'observer au temps  $t$  la valeur  $x$  de  $X(t)$  sachant que le processus stochastique a pris les valeurs  $x_1, x_2, \dots, x_m$  aux instants respectifs  $t_1, t_2, \dots, t_m$  contient trop d'informations. Seule la dernière valeur du processus stochastique est nécessaire pour déterminer sa réalisation à l'instant d'après. C'est en ce sens qu'un processus markovien est dit à mémoire courte. L'approximation markovienne simplifie grandement la description d'un processus stochastique. En effet, on peut démontrer [8] que seulement deux densités de probabilités sont nécessaires pour reconstruire l'entièreté de la hiérarchie des densités de probabilité jointes.

## 2.3 Mouvement brownien

### 2.3.1 Introduction

Le mouvement brownien est le nom attribué au mouvement irrégulier de grains de pollen distribués sur une surface d'eau. Il est souvent mentionné dans la littérature que c'est le botaniste Robert Brown qui a découvert ce phénomène en 1828 [36]. En réalité, Leuwenhook, plus d'un siècle auparavant, avait déjà observé ce phénomène [30]. Cependant, Brown est le premier à avoir compris qu'il s'agissait d'un phénomène important. Les mesures de Perrin et le travail théorique d'Einstein viendront confirmer l'importance de ce phénomène [30]. En effet, le mouvement brownien a permis de démontrer la véracité de l'hypothèse des atomes, hypothèse fortement débattue au début du vingtième siècle [30]. Le mouvement erratique des particules de pollen constitue aujourd'hui un outil fondamental du calcul stochastique.

### 2.3.2 Définition et propriétés

Certains auteurs [9] font une distinction entre la notion de mouvement brownien et de *processus de Wiener*. D'autres, cependant, n'en font pas [36]. Nous adopterons la deuxième convention. Ainsi, dans la suite, les termes *processus de Wiener* et *mouvement brownien* seront utilisés comme des synonymes. Mathématiquement, un *processus de Wiener* ou *mouvement brownien* peut se définir comme suit [36].

**Définition 3** Un processus stochastique  $\{W(t)\}_{t \geq 0}$  est un mouvement brownien si

1. (condition initiale)  $W(0) = 0$
2. (incrémentés indépendants)  $\forall t > s \geq 0$ ,  $W(t) - W(s)$  est indépendant de toutes les valeurs de  $W(u)$  avec  $u$  dans  $[0, s]$
3. (incrémentés gaussiens)  $\forall t > s \geq 0$ ,  $W(t) - W(s)$  suit une loi normale centrée de variance  $t - s$

Un processus de Wiener est dès lors toujours markovien en raison de la propriété 2. En effet, en prenant  $s = 0$  et en utilisant la première propriété, il vient que  $W(t)$  ne dépend pas de  $W(t')$  avec  $t' < t$  pour tout instant  $t$ . En outre, un processus de Wiener possède des trajectoires *continues* en tout point mais *dérivables* en aucun point [36]. Cette propriété remarquable donne des trajectoires très irrégulières<sup>3</sup>. Enfin, il faut noter que deux simulations de trajectoires du *même* mouvement brownien

<sup>3</sup>Le mouvement brownien étant la modélisation mathématique du mouvement erratique des grains de pollen, cette propriété n'est pas surprenante.

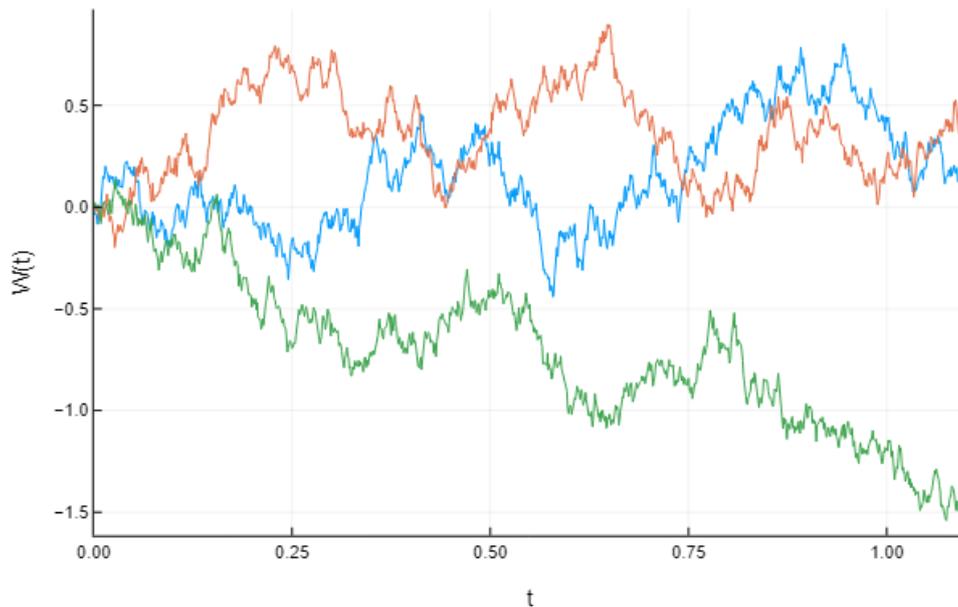


Figure 2.1: Trois simulations de trajectoires différentes relatives au même mouvement brownien. Les simulations, implémentées en *Julia*, contiennent 1128 points équidistants couvrant l'intervalle de temps  $[0, 1.1]$ .

donne des trajectoires *différentes* en raison de la proportionnalité de la variance des incréments avec le temps (propriété 3). La figure 2.1 illustre ces propriétés.

## 2.4 Calcul d'Itô

Itô, à l'instar de Newton et Leibniz, a développé un calcul différentiel. La différence majeure avec le calcul différentiel traditionnel est l'apparition de *différentielles stochastiques du mouvement brownien*<sup>4</sup>  $dW$ . Cette notion peut et doit paraître surprenante. En effet, les trajectoires du mouvement brownien ne sont en aucun point dérivables (*cf.* section précédente); le calcul d'Itô est donc une théorie différentielle de fonctions non-différentiables. Par définition, une *équation différentielle stochastique d'Itô* est de la forme générale

$$dX(t) = a(X(t), t)dt + b(X(t), t)dW(t), \quad (2.6)$$

où  $X(t)$  est un processus stochastique. Le premier terme est intrinsèquement différent du deuxième: le premier terme est *déterministe* alors que le deuxième est *stochastique*, en raison de la différence de nature des différentielles apparaissant dans (2.6). Les coefficients  $a(X(t), t)$  et  $b(X(t), t)$  sont respectivement appelés *coefficient de dérive* et *coefficient de diffusion*. La solution d'une équation d'Itô est *a priori* donnée par intégration

$$X(t) = X(0) + \int_0^t a(X(t'), t')dt' + \int_0^t b(X(t'), t')dW(t') \quad (2.7)$$

Le problème est que la deuxième intégrale n'est, à ce stade, pas une quantité définie. En effet, le sens de la différentielle  $dW$  n'est pas évident et, en outre, le mouvement brownien n'est pas à variations bornées [9]. Cette dernière propriété signifie en particulier que pour toute subdivision  $(0, t_0, t_1, \dots, t_n)$  croissante de l'intervalle  $[0, t]$ , la quantité

$$\sum_{i=1}^n (W(t_i) - W(t_{i-1}))(t_i - t_{i-1})$$

n'admet pas de borne supérieure. Or, c'est justement par une telle somme d'aires de rectangles que l'on définit une intégrale de Riemann. Itô a montré qu'il est possible de contourner habilement ces difficultés en modifiant la définition de l'intégrale [20]. Il en résulte une élégante théorie qui peut être appliquée sans entrer dans les fondements en respectant les trois règles suivantes [30]:

1. Nous utilisons l'identification formelle  $(dW(t))^2 = dt$ .

<sup>4</sup>Cette notion est définie proprement à la fin de cette section.

2. Nous gardons uniquement les différentielles d'ordre au plus un en le temps.
3. Nous respectons les règles du calcul différentiel classique tant que celles-ci ne contredisent pas les deux premières propriétés.

Afin d'illustrer l'application de ces deux règles, considérons une fonction dérivable  $f[X(t)]$  d'un processus stochastique  $X(t)$  satisfaisant une équation du type (2.6) et calculons sa différentielle au sens d'Itô. Par définition, nous avons

$$df[X(t)] = f[X(t) + dX(t)] - f[X(t)]. \quad (2.8)$$

Une expansion de Taylor du premier terme donne alors

$$df[X(t)] = f'[X(t)]dX(t) + \frac{1}{2}f''[X(t)](dX(t))^2 + \dots, \quad (2.9)$$

où la notation  $f'$  désigne la fonction dérivée de  $f$ . Nous nous sommes arrêtés au deuxième ordre en raison de la règle 2. En injectant l'expression explicite de  $X(t)$ , donnée par (2.6), dans le développement de Taylor (2.9), nous obtenons

$$df[X(t)] = [a(X(t), t)dt + b(X(t), t)dW(t)] f'[X(t)] + \frac{1}{2}b(X(t), t)^2(dW(t))^2 f''[X(t)]. \quad (2.10)$$

Enfin, en utilisant la première règle du calcul d'Itô, il vient

$$df[X(t)] = \left[ a(X(t), t)f'[X(t)] + \frac{1}{2}b(X(t), t)f''[X(t)] \right] dt + b(X(t), t)f[X(t)]dW(t) \quad (2.11)$$

Cette relation est célèbre et porte le nom de *formule d'Itô* [9]. Elle contient un terme nouveau, en ce sens que le deuxième terme n'intervient pas dans le calcul différentiel traditionnel.

Pour terminer cette section, attardons nous sur la notion de différentielle stochastique du mouvement brownien  $dW(t)$ . Nous savons qu'un processus stochastique  $\{W(t)\}$  peut-être qualifié de brownien s'il satisfait à la définition axiomatique 3). De façon similaire, nous pouvons définir axiomatiquement une différentielle stochastique du mouvement brownien [14].

**Définition 4** Une différentielle stochastique  $dW(t)$  est une différentielle stochastique du mouvement brownien si

1. (espérance nulle)  $\mathbb{E}(dW(t)) = 0$ ,
2. (normalisation)  $\mathbb{E}(dW(t))^2 = dt$ ,

où la notation  $\mathbb{E}$  désigne la moyenne, ou espérance, sur toutes les fluctuations possibles.

Notons qu'il est possible de montrer [9, 14], à l'aide du *théorème central limite*, que la deuxième condition est équivalente à la condition  $(dW(t))^2 = 0$ . Nous retrouvons alors la première règle du calcul d'Itô.

Comme la mécanique quantique fait usage d'espaces de Hilbert complexes, il convient de généraliser la définition 4 au cas complexe<sup>5</sup>.

**Définition 5** Une différentielle stochastique complexe  $d\xi(t) = dW_R(t) + idW_I(t)$  est une différentielle stochastique du mouvement brownien complexe si

1. (moyenne nulle)  $\mathbb{E}(d\xi(t)) = 0$ .
2. (parties réelles et imaginaires indépendantes)  $\mathbb{E}(\Sigma(d\xi^*(t), d\xi(t))) = 0$ .
3. (normalisation)  $|d\xi(t)|^2 = \mathbb{E}d\xi_R(t)^2 + \mathbb{E}d\xi_I(t)^2 = \frac{dt}{2} + \frac{dt}{2} = dt$ .

La covariance de deux fonctions complexes  $f$  et  $g$  invariantes par multiplication par un facteur de phase<sup>6</sup> est définie par [30]

$$\Sigma(f, g) = \mathbb{E}(f^*g) - (\mathbb{E}f)^*\mathbb{E}g. \quad (2.12)$$

<sup>5</sup>Cette généralisation permet de démontrer la forme générale de l'équation de la diffusion de l'état quantique dans le chapitre trois.

<sup>6</sup>Cette hypothèse est nécessaire pour la définition correcte de la covariance complexe. Dans la suite, cette hypothèse est toujours respectée (voir chapitre 3).

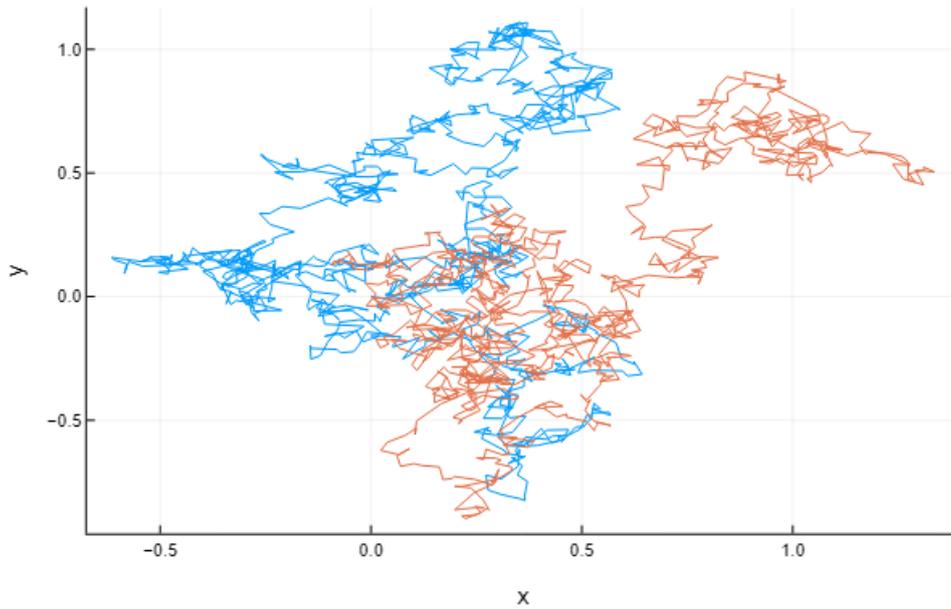


Figure 2.2: Deux exemples de trajectoire brownienne  $\vec{r}(t) = (x(t), y(t))$  obtenue par simulation en *Julia*. La particule démarre à l'origine du système de coordonnées cartésiennes arbitraires et on a choisi la valeur  $a = 1$ . La simulation considère 1024 points répartis sur l'intervalle de temps  $[0, 1]$ .

## 2.5 Retour sur le mouvement brownien

Considérons une particule brownienne diffusant à la surface d'un liquide. Imaginons que cette dernière ne possède pas de vitesse verticale, *i.e.* qu'elle ne coule pas dans le liquide. Elle décrit alors un mouvement brownien et sa position  $\vec{r}(t) = (x(t), y(t))$  est décrite par les équations stochastiques suivantes, appelées *équations de Langevin-Itô* [30]

$$\begin{aligned} dx &= adW, \\ dy &= adW, \end{aligned} \tag{2.13}$$

avec  $a$  un paramètre positif lié à la variance. En effet, si une particule possède un mouvement erratique, nous savons qu'en moyenne son déplacement est nul et la variance de ce déplacement est proportionnelle au temps [30]. Nous avons donc naturellement

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(dx(t)) &= 0, \\ \mathbb{E}(dx(t))^2 &= a^2 dt. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Les équations (2.14) sont simplement une réécriture de la définition d'une différentielle stochastique standard donnée plus haut. La seule différence est l'apparition du paramètre  $a$ . Ce dernier peut être absorbé dans la différentielle  $dx(t)$ , auquel cas  $dx(t)$  acquiert le statut de différentielle du mouvement brownien pour laquelle la notation  $dW(t)$  est consacrée. La figure 2.2 montre le résultat d'une<sup>7</sup> simulation du système (2.13) en *Julia* qui, sans surprise, met en évidence le caractère erratique de la trajectoire suivie par la particule considérée.

Les équations de Langevin-Itô considèrent la trajectoire d'une particule en *particulier*. Il ne s'agit pas de la seule façon de décrire des particules browniennes. En effet, nous pouvons nous intéresser au mouvement d'un *ensemble* de particules. Cette description se fait à l'aide d'une densité de probabilité  $\rho(x, y, t)$  dont nous devons déterminer l'équation d'évolution. La distribution de probabilité au temps  $t + dt$  pour une fluctuation  $dW$  en *particulier* est simplement une translation infinitésimale de la densité  $\rho(x, y, t)$

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t + dt) &= \rho(x - dx, y - dy, t) \\ &= \rho(x - adW, y - adW, t), \end{aligned} \tag{2.15}$$

où nous avons utilisé les relations (2.13). Nous pouvons alors effectuer un développement de Taylor

<sup>7</sup>Rappelons que le caractère stochastique des équations implique directement que chaque simulation donne un résultat quantitativement différent mais qualitativement le même.

du deuxième membre de (2.15). Il vient, en utilisant les règles du calcul d'Itô

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t + dt) = & \rho(x, y, t) - a \left( \frac{\partial \rho}{\partial x}(x, y, t) + \frac{\partial \rho}{\partial y}(x, y, t) \right) dW \\ & + \frac{1}{2} a^2 \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}(x, y, t) + \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2}(x, y, t) \right) (dW)^2. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Pour avoir l'équation d'évolution de la densité de probabilité, il nous reste à prendre l'espérance  $\mathbb{E}$  sur toutes les fluctuations  $dW$  possibles. Comme  $\mathbb{E}dW = 0$  et  $\mathbb{E}(dW)^2 = dt$  par définition, nous avons

$$\rho(x, y, t + dt) = \rho(x, y, t) + \frac{1}{2} a^2 \Delta \rho(x, y, t) dt, \quad (2.17)$$

avec  $\Delta$  le laplacien en coordonnées cartésiennes à deux dimensions. Finalement, nous avons obtenu l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y, t) = \frac{1}{2} a^2 \Delta \rho(x, y, t). \quad (2.18)$$

Cette équation porte le nom d'*équation de Fokker-Planck*. Il est important de souligner que cette dernière est *déterministe* alors que l'équation de Langevin-Itô est *stochastique*. Nous sommes donc parti d'une équation stochastique pour une particule en particulier pour arriver à une équation déterministe pour un ensemble de particules. Cette démarche générale est utilisée dans la suite. Notons, cependant, que le point de vue sera souvent inversé: nous partirons de l'équation maîtresse de l'opérateur densité (déterministe) pour arriver à différentes équations stochastiques. Ces dernières, à l'instar de ce qui vient d'être fait, sont telles que leurs moyennes donnent les mêmes prédictions que celles obtenues à l'aide de l'équation maîtresse.

## 2.6 Les différentielles stochastiques ponctuelles

Nous terminons ce chapitre en introduisant un autre type de différentielles stochastiques: *les différentielles ponctuelles*.

**Définition 6** Une différentielle réelle  $dN(t)$  est dite ponctuelle si

1. (moyenne nulle)  $\mathbb{E}(dN(t)) = \lambda(X(t), t) dt$ .
2. (ponctuelle)  $(dN(t))^2 = dN(t)$ .

Commentons cette définition. D'abord, il convient de remarquer qu'une différentielle de saut n'est pas une différentielle standard, mais plutôt une différentielle stochastique. En effet, les deux conditions de la définition 6 impliquent que les différentielles d'ordre deux ne peuvent *pas* être négligées lors d'un traitement du premier ordre en le temps. Par conséquent, les règles du calcul stochastique ponctuel sont identiques à celles du calcul d'Itô à l'exception de l'identification formelle  $(dW(t))^2 = dt$  qu'il convient de remplacer par  $(dN(t))^2 = dN(t)$ .

Ensuite, la deuxième condition de la définition 6 justifie la dénomination *ponctuelle* car si  $(dN(t))^2 = dN(t)$ , alors  $dN(t)$  ne peut prendre que les deux valeurs 0 et 1. Comme nous le verrons dans la section 3.5.7, une conséquence du caractère ponctuel des différentielles  $dN(t)$  est la non-continuité des solutions  $X(t)$  de l'équation différentielle stochastique

$$dX(t) = a(X(t), t)dt + b(X(t), t)dN(t). \quad (2.19)$$

Pour cette raison, les différentielles ponctuelles sont également connues sous le nom de *différentielles de saut*.

Enfin, notons que la fonction  $\lambda(X(t), t)$  intervenant dans la première condition de la définition 6 est une fonction positive<sup>8</sup> et arbitraire. L'interprétation physique de la première condition est discutée dans la section 3.5.7.

<sup>8</sup>La positivité de  $\lambda(X(t), t)$  est une conséquence immédiate de la deuxième condition de la définition 6.

# Chapitre 3

## Systèmes quantiques ouverts markoviens

Après une brève introduction sur la notion de système quantique ouvert, ce chapitre se concentre sur l'étude des systèmes ouverts markoviens. Nous y démontrons la forme standard de l'équation d'évolution de l'opérateur densité réduit  $\rho_S$  du système  $S$  à l'étude de trois façons différentes et complémentaires. Deux méthodes de résolution de cette équation à l'aide de trajectoires stochastiques sont présentées, démontrées et comparées sur des exemples résolus numériquement. Le code des simulations est disponible dans l'annexe A. Le chapitre se termine sur la présentation succincte d'une troisième méthode stochastique.

### 3.1 Systèmes quantiques ouverts

Un système quantique ouvert peut se définir de la façon suivante [30].

**Définition 7** *Un système quantique est dit ouvert s'il interagit avec son environnement, ce qui donne naissance à de l'intrication entre le système à l'étude et son environnement.*

Une représentation schématique d'un système quantique ouvert est illustrée à la figure 3.1. Un tel système peut, par exemple, être un atome dans un gaz. L'outil mathématique adapté à la description d'un système ouvert  $S$  est l'opérateur densité réduit (*cf.* chapitre 1), noté  $\rho_S$ , dont l'évolution *exacte* est donnée par l'équation (1.16) réécrite ci-dessous

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_S = \text{Tr}_E([H, \rho]). \quad (3.1)$$

Il est naturel de se demander pourquoi il convient d'étudier les systèmes ouverts. En effet, le système total  $S + E$  comprenant l'environnement  $E$  est isolé par construction. Dès lors, nous savons<sup>1</sup> que l'opérateur densité  $\rho$  de  $S + E$  obéit à l'équation de Liouville-von Neumann (1.4)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H, \rho]. \quad (3.2)$$

Une fois la solution  $\rho$  trouvée, il nous suffit de prendre la trace sur l'environnement  $\text{Tr}_E$  pour obtenir  $\rho_S$ . Finalement,  $\rho_S$  étant connu, les valeurs moyennes des observables du système  $S$  peuvent être prédites *via*

$$\langle A \rangle = \text{Tr}_S(\rho_S A), \quad (3.3)$$

en raison des résultats du chapitre 1. Cependant, cette approche n'est pas réalisable en pratique car, en général, la dynamique du système isolé  $S + E$  est bien trop compliquée [8]. L'environnement contient beaucoup trop d'informations qui, dans la plupart des cas, se révèlent non pertinentes dans l'étude menée. Il convient dès lors d'introduire une nouvelle théorie: la théorie des systèmes ouverts. Ajoutons encore qu'aucun système<sup>2</sup> n'est réellement ouvert [30]: tout système a interagi ou interagit avec un environnement. Sous cette perspective, l'étude des systèmes ouverts s'avère fondamentale. Nous abandonnons dès lors l'étude du système  $S + E$  dans sa globalité et la suite de ce chapitre présente des méthodes d'*approximations* de l'équation (3.1). En particulier, nous supposons dans ce chapitre que les systèmes sont markoviens.

<sup>1</sup>Cette section fait un usage intensif des notions introduites dans le chapitre 1.

<sup>2</sup>L'univers dans son entièreté est une exception.

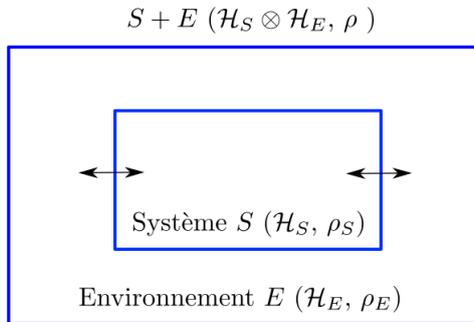


Figure 3.1: Représentation classique d'un système quantique ouvert  $S$ , décrit par un espace de Hilbert  $\mathcal{H}_S$  et un opérateur densité  $\rho_S$  plongé dans un environnement d'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_E$  et d'opérateur densité  $\rho_E$ .

## 3.2 Forme standard de l'équation maîtresse

L'objectif de cette section est de démontrer la forme la plus générale de l'équation d'évolution de l'opérateur densité pour des systèmes quantiques ouverts markoviens. Nous savons que pour des systèmes *fermés*, l'opérateur densité évolue suivant l'équation Liouville-von Neumann (3.2). Cette dernière peut se réécrire de la façon suivante

$$\frac{d}{dt}\rho = \mathcal{L}(\rho), \quad (3.4)$$

où l'objet mathématique  $\mathcal{L}$  défini par

$$\mathcal{L}(\rho) = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho] \quad (3.5)$$

est appelé *superopérateur de Liouville* car il s'agit d'une application qui, à tout opérateur, associe un autre opérateur suivant la loi (3.5). Nous allons montrer que démontrer la forme générale de l'équation d'évolution d'un opérateur densité décrivant un système quantique ouvert markovien revient à chercher un autre superopérateur, généralisant (3.5), de sorte que l'équation (3.4) soit applicable à des systèmes à mémoire courte (*i.e.* markoviens). Notons que nous appelons *équation maîtresse* toute équation d'évolution de l'opérateur densité réduit relatif à un système ouvert.

### 3.2.1 Concepts préliminaires

Avant de passer à la démonstration à proprement parler de la forme la plus générale de l'équation maîtresse markovienne, il convient d'introduire quelques concepts clés.

#### L'espace de Liouville

Considérons un espace hilbertien  $\mathcal{H}$ . L'espace de Liouville est défini comme l'espace des opérateurs  $A$  linéaires agissant sur  $\mathcal{H}$  tels que

$$\text{Tr}[A^\dagger A] \quad (3.6)$$

est fini. Par ailleurs, il est immédiat de vérifier que l'application

$$\langle A|B \rangle_{\text{Liouville}} \equiv \text{Tr}[A^\dagger B], \quad \forall \hat{A}, \hat{B} \quad (3.7)$$

définit un produit scalaire sur l'espace de Liouville<sup>3</sup>. Muni de ce produit scalaire, l'espace de Liouville est un espace de Hilbert [16].

Il est important de souligner l'analogie avec la construction de l'espace de Hilbert des fonctions d'onde. En effet, en mécanique quantique, une fonction d'onde  $\phi(\vec{r}, t)$  doit être telle que

$$\int d^3r \phi^*(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) \quad (3.8)$$

<sup>3</sup>En toute généralité, une application  $\langle \cdot, \cdot \rangle : E \times E \rightarrow \mathbb{C}$  définit un produit scalaire sur un espace vectoriel  $E$  complexe si elle vérifie les propriétés suivantes:

1. (*linéarité sur le deuxième argument*)  $\forall |\phi\rangle, |\xi\rangle, |\psi\rangle \in E$ , on a  $\langle \phi, \mu\xi + \nu\psi \rangle = \mu \langle \phi, \xi \rangle + \nu \langle \phi, \psi \rangle \quad \forall \mu, \nu \in \mathbb{C}$ .
2. (*symétrique*)  $\langle \phi, \xi \rangle = \langle \xi, \phi \rangle^* \quad \forall |\phi\rangle, |\xi\rangle \in E$ .
3. (*positivité*)  $\langle \phi, \phi \rangle \geq 0$  et  $\langle \phi, \phi \rangle = 0 \Rightarrow |\phi\rangle = |0\rangle \quad \forall |\phi\rangle \in E$ .

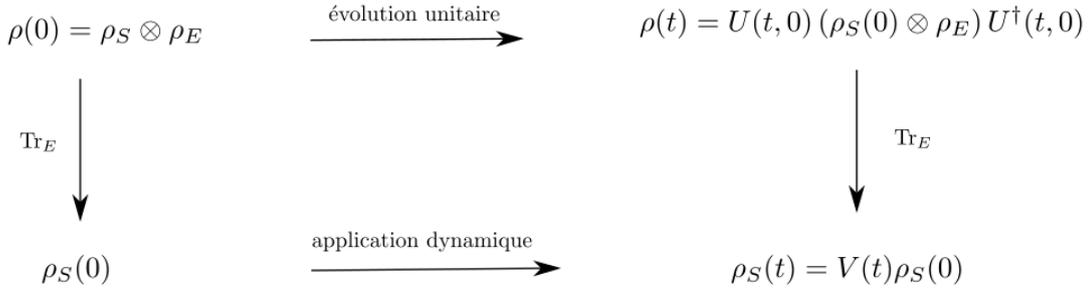


Figure 3.2: Diagramme illustrant l'action de  $U(t, 0)$ , de l'application dynamique  $V(t)$  et de la trace partielle  $\text{Tr}_E$ .

est égal à l'unité (et donc fini) à tout instant. Le produit scalaire de deux fonctions d'onde se définit naturellement par la relation

$$\langle \phi | \chi \rangle_{\text{Etats}} \equiv \int d^3r \phi^*(\vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) \quad \forall |\phi\rangle, |\chi\rangle. \quad (3.9)$$

L'espace des fonctions d'onde est également un espace de Hilbert et est généralement appelé *espace des états* du système considéré.

L'intérêt de l'espace de Liouville réside en sa capacité de représenter des superopérateurs par des matrices. Comme ses éléments ou vecteurs sont les opérateurs agissant sur un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  donné, les superopérateurs sont des opérateurs dans l'espace de Liouville. Ils admettent donc une représentation matricielle dès lors qu'une base est choisie.

La dimension de l'espace de Liouville relatif à l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  de dimension *finie*  $N$  est donnée par  $N^2$ . En effet, si  $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^N$  est une base de  $\mathcal{H}$ , alors l'ensemble des projecteurs  $\{|\phi_i\rangle\langle\phi_j|\}_{i,j=1}^{N^2}$  forme une base de l'espace de Liouville associé à  $\mathcal{H}$ . Nous renvoyons le lecteur vers la référence [12] pour une revue complète de l'espace de Liouville.

### Application dynamique quantique

Soit un système  $S$  ouvert en interaction avec son environnement  $E$ . Supposons qu'il est possible de préparer le système isolé  $S + E$  au temps  $t = 0$  dans l'état séparé  $\rho(0)$  suivant

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E, \quad (3.10)$$

où  $\rho_E$  représente un état de référence de l'environnement, un état thermique par exemple. Notons  $U(t, 0)$  l'opérateur unitaire d'évolution du système total  $S + E$  décrivant l'évolution, gouvernée par l'hamiltonien total  $H_{tot}$ , d'un état initial  $\rho(0)$  du système isolé. Par définition, nous avons

$$\rho(t) = U(t, 0) \rho(0) U^\dagger(t, 0). \quad (3.11)$$

Dès lors, l'état  $\rho_S(t)$  du système  $S$  à un certain temps  $t > 0$  peut s'écrire

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_E (U(t, 0) (\rho_S(0) \otimes \rho_E) U^\dagger(t, 0)), \quad (3.12)$$

par définition de l'opérateur densité réduit. Si, à présent, nous considérons fixés l'état de référence de l'environnement et le temps  $t$ , nous avons défini une application  $V(t)$  décrivant le changement de l'état du système ouvert de l'instant initial au temps  $t$ . Mathématiquement, cette application se définit naturellement par (en vertu de (3.12))

$$V(t) : \rho(\mathcal{H}_S) \rightarrow \rho(\mathcal{H}_S), \quad \rho_S \mapsto V(t) \rho_S = \text{Tr}_E (U(t, 0) (\rho_S \otimes \rho_E) U^\dagger(t, 0)), \quad (3.13)$$

où  $\rho(\mathcal{H}_S)$  est l'espace de tous les opérateurs densité agissant sur  $\mathcal{H}_S$ , l'espace de Hilbert du système  $S$ . L'application  $V(t)$  est ce que l'on appelle une *application dynamique quantique* [35, 8]. La figure 3.2 illustre l'action de  $V(t)$ .

Il est possible de caractériser une application dynamique quantique uniquement en fonction de l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_{SE}$  du système ouvert  $S$ . A cette fin, on utilise la décomposition spectrale de l'opérateur  $\rho_E$

$$\rho_E = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (3.14)$$

dans une base  $\{|\phi_i\rangle\}$  orthonormée de l'espace de Hilbert de l'environnement  $\mathcal{H}_E$ . Comme déjà mentionné dans le chapitre 1, les constantes  $\lambda_i$  doivent être positives et de somme unité. Nous notons  $\{|\psi_j\rangle\}$  une base orthonormée de  $\mathcal{H}_S$ . Dès lors, une base de l'espace  $\mathcal{H}_{S+E} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$  est donnée par  $\{|\psi_j\rangle \otimes |\phi_i\rangle\}$  et la représentation de l'équation (3.12) s'écrit successivement:

$$\begin{aligned}
(\rho_S(t))_{kl} &= (V(t)\rho_S(0))_{kl} \\
&= \sum_{\alpha} \langle \psi_k \otimes \phi_{\alpha} | U(t,0) (\rho_S(0) \otimes \rho_E) U^{\dagger}(t,0) | \psi_l \otimes \phi_{\alpha} \rangle \\
&= \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon} (U(t,0))_{k\alpha, \beta\gamma} \langle \psi_{\beta} \otimes \phi_{\gamma} | (\rho_S(0) \otimes \rho_E) | \psi_{\delta} \otimes \phi_{\epsilon} \rangle (U(t,0))_{\delta\epsilon, l\alpha}^{\dagger} \\
&= \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon} (U(t,0))_{k\alpha, \beta\gamma}^{\dagger} (\rho_S(0))_{\beta\delta} \langle \phi_{\gamma} | \rho_E | \phi_{\epsilon} \rangle (U(t,0))_{\delta\epsilon, l\alpha}^{\dagger} \\
&= \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon, i} \lambda_i (U(t,0))_{k\alpha, \beta\gamma} (\rho_S(0))_{\beta\delta} \langle \phi_{\gamma} | \phi_i \rangle \langle \phi_i | \phi_{\epsilon} \rangle (U(t,0))_{\delta\epsilon, l\alpha}^{\dagger} \\
&= \sum_{\alpha, \beta, \delta, i} \lambda_i (U(t,0))_{k\alpha, \beta i} (\rho_S(0))_{\beta\delta} (U(t,0))_{\delta i, l\alpha}^{\dagger},
\end{aligned} \tag{3.15}$$

où nous avons utilisé la définition de la trace partielle (deuxième ligne), deux relations de fermeture (troisième ligne), et la relation (3.14) (quatrième ligne). Ajoutons que les éléments de matrice sont désignés par des parenthèses indicées<sup>4</sup> et que  $(U(t,0))_{ij,kl}^{\dagger}$  désigne la matrice adjointe de  $(U(t,0))_{ij,kl}$ . Compte tenu de (3.15), l'application dynamique  $V(t)$  admet la forme

$$V(t)\rho_S(0) = \rho_S(t) = \sum_{\alpha\beta} W_{\alpha\beta}(t)\rho_S(0)W_{\alpha\beta}^{\dagger}(t), \tag{3.16}$$

où l'opérateur  $W(t)$ , agissant sur  $\mathcal{H}_S$ , est défini par la relation

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sqrt{\lambda_{\beta}} \langle \phi_{\alpha} | U(t,0) | \phi_{\beta} \rangle. \tag{3.17}$$

Comme  $U(t,0)$  est unitaire, on vérifie aisément que

$$\sum_{\alpha\beta} W_{\alpha\beta} W_{\alpha\beta}^{\dagger} = I \tag{3.18}$$

avec  $I$  l'opérateur identité. Enfin, cette dernière équation permet d'écrire

$$\text{Tr}_S(V(t)\rho_S(0)) = \text{Tr}\rho_S(t) = 1. \tag{3.19}$$

En conclusion, nous venons de montrer qu'une application dynamique vérifie toujours les relations (3.16) et (3.18) et préserve la trace (3.19). Inversement, on peut montrer [35] qu'il est toujours possible de construire une application dynamique définie par (3.13) pour autant que les relations (3.16) et (3.18) soient vérifiées. Autrement dit, ces deux relations caractérisent complètement les applications dynamiques d'un système  $S$ .

### Application complètement positive

Nous savons que les équations (3.16) et (3.18) caractérisent complètement les équations dynamiques. Il existe une autre caractérisation, purement mathématique, s'appuyant sur le concept d'*application complètement positive*. Afin de déterminer cette nouvelle caractérisation, considérons une fonction  $V(t) : \rho(\mathcal{H}_S) \rightarrow \rho(\mathcal{H}_S)$  et demandons-nous quelles sont les conditions minimales que  $V(t)$  doit satisfaire pour être un endomorphisme, *i.e*  $V(t)\rho$  doit être un opérateur densité pour tout  $\rho$ . Autrement dit, nous cherchons la façon la plus générale d'envoyer des opérateurs densité sur des opérateurs densité. Il est naturel, en vertu de la définition 1 d'un opérateur densité, d'exiger *a priori* les conditions suivantes:

1.  $V(t)\rho \geq 0 \quad \forall \rho \in \mathcal{H}_S$ . L'application  $V(t)$  est alors dite *positive*.
2.  $\text{Tr}(V(t)\rho) = 1 \quad \forall \rho \in \mathcal{H}_S$ . L'application  $V(t)$  préserve la trace.

Il se trouve que la condition 1 est en réalité trop faible. En effet, imaginons que notre système  $S$ , caractérisé par l'application dynamique  $V(t)$ , soit associé à un autre système  $S'$  mais que la dynamique des deux systèmes soit séparée. Supposons également que le système  $S'$ , d'espace de Hilbert  $\mathcal{H}'_N$  de dimension finie  $N$ , est décrit par l'application dynamique identité  $I_N$ . Dans ce cas, il est clair que la dynamique du système total  $S + S'$  devrait être décrite par  $V(t) \otimes I_N$ . Or, l'application  $V(t) \otimes I_N$  n'est pas toujours positive et ce, même si  $V(t)$  est positive [37]. Il vient alors la définition suivante (avec les mêmes notations).

<sup>4</sup>Par exemple,  $(U(t,0))_{k\alpha, \beta\gamma} = \langle \psi_k \otimes \phi_{\alpha} | U(t,0) | \psi_{\beta} \otimes \phi_{\gamma} \rangle$ .

**Définition 8** Une application  $V(t)$  est dite complètement positive si l'application  $V(t) \otimes I_N$  est positive pour tout  $N$ .

Comme il est toujours possible d'imaginer un système  $S'$  tel que défini plus haut, les conditions 1 et 2 que  $V(t)$  doit satisfaire sont les suivantes.

1. L'application  $V(t)$  doit être complètement positive.
2. L'application  $V(t)$  doit préserver la trace.

Il s'avère que ces conditions caractérisent complètement les applications dynamiques [37]. En résumé, une application dynamique est une application complètement positive préservant la trace ou plus simplement une application CPT (*Completely positive and trace preserving map* en anglais). Pour finir, notons que le concept d'application CPT n'ajoute aucune nouvelle hypothèse physique: il s'agit d'une réécriture mathématique dont l'importance a été reconnue par de grands physiciens comme Lindblad, Kraus ou encore Gorini, Kossakowski et Sudarshan [35]. Pour une revue complète du sujet, nous renvoyons le lecteur vers [37].

### Semi-groupe dynamique quantique

Jusqu'à présent, nous avons toujours considéré individuellement des applications dynamiques quantiques  $V(t)$  avec  $t$  fixé. Si nous laissons varier le paramètre  $t$ , nous obtenons une famille  $\{V(t)\}_{t \geq 0}$  décrivant le futur du système  $S$  considéré. Notons que nous avons évidemment que  $V(0)$  est l'opérateur identité vu la définition d'une application dynamique quantique. Si nous supposons que le système  $S$  en contact avec l'environnement  $E$  est markovien, alors la famille  $\{V(t)\}_{t \geq 0}$  doit vérifier la relation<sup>5</sup>

$$V(t_1 + t_2) = V(t_1)V(t_2) \quad \forall t_1, t_2 \geq 0. \quad (3.20)$$

Cette propriété permet à la famille  $\{V(t)\}_{t \geq 0}$  d'acquérir le statut de semi-groupe, dont la définition générale est présentée ci-dessous [32].

**Définition 9** Un semi-groupe de superopérateurs est un ensemble d'opérateurs  $\{V(t)\}_{t \geq 0}$  vérifiant:

1.  $V(0) = I$
2.  $V(t_1 + t_2) = V(t_1)V(t_2) \quad \forall t_1, t_2 \geq 0$

Il est important que la famille  $\{V(t)\}_{t \geq 0}$  soit un semi-groupe. En effet, dans ce cas, la théorie générale des semi-groupes nous permet d'écrire, si le groupe est "assez" continu (voir fin de section)

$$V(t) = \exp(\mathcal{L}t), \quad (3.21)$$

où  $\mathcal{L}$  est un opérateur linéaire appelé *générateur du semi-groupe*. L'équation (3.21) fournit alors directement une équation différentielle du premier ordre pour l'opérateur densité réduit  $\rho_S$ . En effet, par définition de  $V(t)$ , il vient directement

$$\begin{aligned} \rho_S(t) &= V(t)\rho_S(0) = \exp(\mathcal{L}t)\rho_S(0) \\ \iff \frac{d}{dt}\rho_S &= \mathcal{L}\rho_S \end{aligned} \quad (3.22)$$

Cette dernière équation est une généralisation de l'équation de Liouville-von Neumann (3.4) pour des systèmes *ouverts* markoviens où le superopérateur de Liouville est remplacé par le générateur du semi-groupe dynamique quantique. Autrement dit, les systèmes quantiques ouverts markoviens et les systèmes quantiques isolés admettent la même structure d'équation maîtresse en raison de la structure de semi-groupe qu'adopte la famille  $\{V(t)\}_{t \geq 0}$  d'applications dynamiques quantiques.

Le semi-groupe  $\{V(t)\}_{t \geq 0}$  doit exhiber une certaine continuité pour pouvoir écrire l'équation (3.21). Comme les applications dynamiques vivent dans l'espace de Liouville, les auteurs exigent souvent la continuité liée à la norme (3.7) de cet espace [35, 37]

$$\lim_{t \rightarrow 0} \text{Tr}(V(t)\rho - \rho) = 0 \quad \forall \rho. \quad (3.23)$$

Il nous est maintenant possible de définir un *semi-groupe dynamique quantique* [37].

**Définition 10** Un semi-groupe dynamique quantique est un ensemble d'opérateurs  $\{V(t)\}_{t \geq 0}$  vérifiant les assertions suivantes.

<sup>5</sup>La section 3.3 peut être considérée comme étant une preuve de cette assertion car nous démontrons, toujours dans l'hypothèse markovienne, la même équation que celle résultant de la condition 3.20 [8].

1. (application CPT)  $V(t)$  est une application complètement positive préservant la trace  $\forall t \geq 0$ .
2. (propriété de semi-groupe)  $V(t_1 + t_2) = V(t_1)V(t_2) \quad \forall t_1, t_2 \geq 0$
3. (continuité)  $\lim_{t \rightarrow 0} \text{Tr}(V(t)\rho - \rho) = 0 \quad \forall \rho$

Notons finalement que la théorie générale des semi-groupes dynamiques quantiques s'écrit souvent à l'aide du point de vue de Heisenberg et non celui de Schrödinger (utilisé ici). Pour de plus amples informations, nous renvoyons à nouveau le lecteur vers [37].

### 3.2.2 Forme standard de l'équation maîtresse

Démontrons la forme standard de l'équation maîtresse d'un système  $S$  markovien ouvert dans le cas où l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_S$  est de dimension finie  $N$ . Vu les résultats de la section précédente, nous savons que l'équation maîtresse d'un système ouvert markovien est donnée par

$$\frac{d}{dt}\rho_S = \mathcal{L}\rho_S, \quad (3.24)$$

avec  $\mathcal{L}$  le générateur du semi-groupe dynamique quantique relatif au système  $S$ . Ainsi, notre problème se résume à déterminer ce générateur. Dans ce but, nous introduisons une base orthonormée  $\{F_i\}_{i=1}^{N^2}$  de l'espace de Liouville, *i.e.* satisfaisant

$$\langle F_i | F_j \rangle_{\text{Liouville}} = \langle F_i | F_j \rangle_L = \text{Tr}[F_i^\dagger F_j] = \delta_{ij}, \quad (3.25)$$

avec  $\delta_{ij}$  le symbole de Kronecker. Sans perte de généralité, nous pouvons poser

$$F_{N^2} = \frac{1}{\sqrt{N}} I_L \quad (3.26)$$

où  $I_L$  est l'opérateur identité de l'espace de Liouville. Il est alors trivial de montrer que la norme de Liouville de cet élément est égale à l'unité et que les autres éléments de la base  $\{F_i\}_{i=1}^{N^2}$  sont sans trace vu (3.25).

Dans l'espace de Liouville, la relation de fermeture s'écrit

$$I_L = \sum_{i=1}^{N^2} |F_i\rangle_L \langle F_i|_L, \quad (3.27)$$

où l'indice  $L$  indique que les kets et bras se rapportent à l'espace de Liouville. En appliquant cette relation aux  $W_{\alpha\beta}(t)$  définis par (3.17), nous avons

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sum_{i=1}^{N^2} \langle F_i | W_{\alpha\beta}(t) \rangle_L F_i. \quad (3.28)$$

En injectant (3.28) dans l'expression de l'action d'une application dynamique  $V(t)$  (3.16), il vient successivement

$$\begin{aligned} V(t)\rho_S(0) &= \sum_{\alpha\beta} W_{\alpha\beta}(t)\rho_S(0)W_{\alpha\beta}^\dagger(t) \\ &= \sum_{\alpha\beta} \left[ \sum_{i=1}^{N^2} \langle F_i | W_{\alpha\beta}(t) \rangle_L F_i \rho_S(0) \sum_{j=1}^{N^2} F_j^\dagger \langle W_{\alpha\beta}(t) | F_j \rangle_L \right] \\ &= \sum_{ij=1}^{N^2} c_{ij}(t) F_i \rho_S(0) F_j^\dagger, \end{aligned} \quad (3.29)$$

où nous avons posé  $c_{ij}(t) = \sum_{\alpha\beta} \langle F_i | W_{\alpha\beta}(t) \rangle_L \langle W_{\alpha\beta}(t) | F_j \rangle_L$ . La dérivée temporelle de  $\rho_S$  est donnée par

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S}{dt}(t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} (\rho_S(t + \Delta t) - \rho_S(t)) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} (V(\Delta t)\rho_S(t) - \rho_S(t)), \end{aligned} \quad (3.30)$$

par définition de  $V(t)$ . En introduisant la relation (3.29) dans cette dérivée, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho_S}{dt}(t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left( \sum_{ij=1}^{N^2} c_{ij}(\Delta t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger - \rho_S \right) \\
&= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left( \sum_{ij=1}^{N^2-1} c_{ij}(\Delta t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger + \sum_{i=1}^{N^2-1} c_{iN}(\Delta t) F_i \rho_S(t) F_{N^2}^\dagger \right. \\
&\quad \left. + \sum_{j=1}^{N^2-1} c_{N^2j}(\Delta t) F_{N^2} \rho_S(t) F_j^\dagger + c_{N^2N^2}(\Delta t) F_{N^2} \rho_S(t) F_{N^2}^\dagger - \rho_S(t) \right) \\
&= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left( \sum_{ij=1}^{N^2-1} c_{ij}(\Delta t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} c_{iN}(\Delta t) F_i \rho_S(t) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N^2-1} c_{N^2j}(\Delta t) \rho_S(t) F_j^\dagger + \frac{1}{N} c_{N^2N^2}(\Delta t) \rho_S(t) - \rho_S(t) \right), \tag{3.31}
\end{aligned}$$

où nous avons décomposé la somme pour utiliser  $F_N = \frac{1}{\sqrt{N}} I_L$ . Nous remarquons qu'il est alors possible d'absorber la limite à l'aide de constantes définies par

$$\begin{aligned}
g_{ij} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{c_{ij}(\Delta t)}{\Delta t} \quad \forall i, j < N^2, \\
g_{iN^2} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{c_{iN^2}(\Delta t)}{\Delta t} \quad \forall i < N^2, \\
g_{N^2j} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{c_{N^2j}(\Delta t)}{\Delta t} \quad \forall j < N^2, \\
g_{N^2N^2} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{c_{N^2N^2}(\Delta t) - N}{\Delta t}. \tag{3.32}
\end{aligned}$$

En termes de ces constantes, la dérivée de l'opérateur densité  $\rho_S(t)$  donnée par (3.31) se réécrit comme suit

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = \sum_{ij=1}^{N^2-1} g_{ij} F_i \rho_S(t) F_j^\dagger + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} g_{iN^2} F_i \rho_S(t) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N^2-1} g_{N^2j} \rho_S(t) F_j^\dagger + \frac{g_{N^2N^2}}{N} \rho_S(t). \tag{3.33}$$

A ce stade, il est utile de définir un nouvel opérateur, noté  $F$ , par

$$F = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N^2-1} g_{i, N^2} F_i, \tag{3.34}$$

de sorte que la deuxième et troisième somme de (3.33) soient absorbées dans l'opérateur  $F$ . Nous pouvons donc écrire

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = \sum_{ij=1}^{N^2-1} g_{ij} F_i \rho_S(t) F_j^\dagger + F \rho_S(t) + \rho_S(t) F^\dagger + \frac{g_{N^2N^2}}{N} \rho_S(t). \tag{3.35}$$

Décomposons à présent l'opérateur  $F$  en deux parties afin de faire apparaître dans l'équation (3.35) le commutateur de l'équation (3.2) de Liouville-von Neumann

$$F = \frac{F + F^\dagger}{2} + i\hbar \frac{F - F^\dagger}{2\hbar i} = G' - \frac{i}{\hbar} H. \tag{3.36}$$

Il est aisé de vérifier que les opérateurs  $G' = \frac{F+F^\dagger}{2}$  et  $H = -\hbar \frac{F-F^\dagger}{2i}$  sont hermitiens. En injectant la décomposition (3.36) de  $F$  dans l'équation (3.35), il vient directement

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = \sum_{ij=1}^{N^2-1} g_{ij} F_i \rho_S(t) F_j^\dagger + \{G', \rho_S(t)\} - \frac{i}{\hbar} [H, \rho_S(t)] + \frac{g_{N^2N^2}}{N} \rho_S(t), \tag{3.37}$$

où  $\{G', \rho_S(t)\} = G' \rho_S(t) + \rho_S(t) G'$  est l'anticommutateur des opérateurs  $G'$  et  $\rho_S(t)$ .

Nous introduisons finalement un dernier opérateur

$$G = G' + \frac{1}{2N} g_{N^2 N^2} I_L, \quad (3.38)$$

de sorte que (3.37) conduise à

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho_S(t)] + \{G, \rho_S(t)\} + \sum_{ij=1}^{N^2-1} g_{ij} F_i \rho_S(t) F_j^\dagger. \quad (3.39)$$

En égalant la dérivée temporelle de l'opérateur densité réduit  $\rho_S(t)$  au générateur du semi-groupe dynamique quantique appliqué à ce même opérateur en vertu de (3.24), nous obtenons l'expression du générateur  $\mathcal{L}$

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho_S(t)] + \{G, \rho_S(t)\} + \sum_{ij=1}^{N^2-1} g_{ij} F_i \rho_S(t) F_j^\dagger. \quad (3.40)$$

Comme le semi-groupe préserve la trace, nous avons, en utilisant la propriété cyclique de la trace<sup>6</sup>

$$0 = \text{Tr}_S[\mathcal{L}\rho_S(t)] = \text{Tr}_S \left[ \left( 2G + \sum_{ij=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i \right) \rho_S(t) \right]. \quad (3.41)$$

Vu que l'équation (3.41) doit être valable pour n'importe quel opérateur densité  $\rho_S(t)$ , nous en déduisons

$$G = -\frac{1}{2} \sum_{ij=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i. \quad (3.42)$$

Cette dernière équation, injectée dans (3.40), conduit directement à la *forme standard* du générateur  $\mathcal{L}$

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho_S(t)] + \sum_{ij=1}^{N^2-1} g_{ij} \left( F_i \rho_S(t) F_j^\dagger - \frac{1}{2} \{F_j^\dagger F_i, \rho_S\} \right). \quad (3.43)$$

Le générateur  $\mathcal{L}$  admet une deuxième forme, appelée forme *diagonale*. Pour la déterminer, remarquons premièrement que la matrice  $(g_{ij})$  est hermitienne car les coefficients  $g_{ij}$  sont définis simplement, sans l'apparition de nombres complexes, à partir des  $c_{ij}(t) = \sum_{\alpha\beta} \langle F_i | W_{\alpha\beta}(t) \rangle_L \langle W_{\alpha\beta}(t) | F_j \rangle_L$  qui forment une matrice hermitienne<sup>7</sup>. En outre, les coefficients  $c_{ij}$  définissent une matrice définie positive car nous avons

$$\begin{aligned} \sum_{ij} c_{ij}(t) v_i^* v_j &= \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} \langle F_i | W_{\alpha\beta}(t) \rangle_L \langle W_{\alpha\beta}(t) | F_j \rangle_L v_i^* v_j \\ &= \sum_{\alpha\beta} \left\langle \sum_i v_i F_i \middle| W_{\alpha\beta}(t) \right\rangle_L \left\langle W_{\alpha\beta}(t) \middle| \sum_j v_j F_j \right\rangle_L \\ &= \sum_{\alpha\beta} \left| \left\langle \sum_i v_i F_i \middle| W_{\alpha\beta}(t) \right\rangle_L \right|^2 \geq 0, \end{aligned} \quad (3.44)$$

pour tout vecteur  $v$  appartenant à un espace vectoriel complexe de  $N^2$  dimensions. Dès lors, à nouveau en vertu de leur définition, les coefficients  $g_{ij} \quad \forall i, j = 1, \dots, N^2 - 1$  définissent également une matrice positive. Comme la matrice  $(g_{ij})$  est hermitienne, il existe une matrice unitaire  $u$  qui la diagonalise

$$ugu^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_{N^2-1} \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

<sup>6</sup>Rappelons deux propriétés de la trace.

1. La trace d'un commutateur de deux opérateurs est nulle pour autant qu'elle soit définie.
2. La trace est cyclique, *i.e.* qu'elle est invariante par permutation circulaire. Par exemple, on peut écrire  $\text{Tr}[ABC] = \text{Tr}[CAB]$  avec  $A, B$  et  $C$  des opérateurs.

<sup>7</sup>En effet, on a  $c_{ji}(t)^* = \left( \sum_{\alpha\beta} \langle F_j | W_{\alpha\beta}(t) \rangle_L \langle W_{\alpha\beta}(t) | F_i \rangle_L \right)^* = \sum_{\alpha\beta} \langle F_i | W_{\alpha\beta}(t) \rangle_L \langle W_{\alpha\beta}(t) | F_j \rangle_L = c_{ij}(t)$ .

où les valeurs propres  $\gamma_i$  sont positives en vertu de la positivité des matrices  $(g_{ij})$ . Si nous introduisons un nouvel ensemble d'opérateurs  $\{A_k\}_{0 \leq k \leq N^2-1}$  définis comme suit

$$F_i = \sum_{k=1}^{N^2-1} u_{ki} A_k, \quad (3.46)$$

alors l'équation (3.43) peut s'écrire en fonction des  $A_k$

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho_S(t)] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left( A_k \rho_S(t) A_k^\dagger - \frac{1}{2} A_k^\dagger A_k \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S(t) A_k^\dagger A_k \right). \quad (3.47)$$

Cette dernière équation est l'expression explicite de la forme diagonale du générateur  $\mathcal{L}$ . Nous venons donc de montrer que tout système quantique ouvert markovien caractérisé par un espace de Hilbert de dimension finie est décrit par une équation maîtresse qui peut toujours se mettre sous la forme diagonale ci-dessus.

Terminons cette section par la définition des *opérateurs de Lindblad ou lindbladiens*  $L_k$ . Ils sont simplement définis en termes des  $A_k$  par la relation

$$L_k = \sqrt{\gamma_k} A_k, \quad (3.48)$$

de sorte que l'équation maîtresse (3.47) admet la forme équivalente suivante

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho_S(t)] + \sum_{k=1}^{N^2-1} L_k \rho_S(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2} L_k^\dagger L_k \rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t) L_k^\dagger L_k \quad (3.49)$$

qui est souvent appelée *équation de Lindblad*.

### 3.2.3 Commentaires

Quelques remarques fondamentales sur l'équation maîtresse (3.47) s'imposent. Premièrement, le terme contenant l'opérateur  $H$  de l'équation (3.47) et de l'équation de Lindblad (3.49) est structurellement identique à celui de l'équation de Liouville-von Neumann (3.4) décrivant les systèmes quantiques isolés. Nous en déduisons que le terme  $-\frac{i}{\hbar}[H, \rho_S(t)]$  décrit la dynamique *interne* du système isolé. Le terme contenant les opérateurs de Lindblad  $L_k$  est quant à lui nouveau en ce sens qu'il n'apparaît pas dans l'équation de Liouville von-Neumann (3.4). Par conséquent, l'expression

$$\sum_{k=1}^{N^2-1} L_k \rho_S(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2} L_k^\dagger L_k \rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t) L_k^\dagger L_k, \quad (3.50)$$

doit nécessairement décrire l'influence de l'environnement sur le système  $S$ .

Par ailleurs, si nous supposons que notre système  $S$  ouvert est presque isolé, l'interaction avec l'environnement est négligeable et, de ce fait, le deuxième terme contenant les opérateurs de Lindblad peut être négligé. Nous retrouvons alors l'équation de Liouville-von Neumann (3.4): la dynamique du système respecte l'équation de Schrödinger et l'opérateur  $H$  est l'hamiltonien du système  $S$ . A l'inverse, si le système interagit très fortement avec son environnement de sorte que les effets de  $H$  soient négligeables, alors l'évolution du système est déterminé par les opérateurs de Lindblad uniquement. Un tel système ouvert est dit *complètement ouvert* [30].

Notons que l'interprétation physique de l'opérateur  $H$  apparaissant dans (3.47) et (3.49) n'est pas claire<sup>8</sup>. A ce stade, nous sommes juste en mesure d'affirmer que l'opérateur  $H$  doit nécessairement tendre vers l'hamiltonien du système pour un système ouvert presque isolé.

Ensuite, l'équation maîtresse (3.47) est une équation différentielle linéaire pour  $\rho_S(t)$  invariante par rapport aux deux transformations suivantes [8]:

1. Transformation unitaire de l'ensemble des opérateurs de Lindblad. De manière explicite, une telle transformation s'écrit

$$\sqrt{\gamma_i} A_i \rightarrow \sqrt{\gamma'_i} A'_i = \sum_j u_{ij} \sqrt{\gamma_j} A_j, \quad (3.51)$$

avec  $(u_{ij})$  une matrice unitaire.

<sup>8</sup>La section suivante clarifie l'interprétation de  $H$ .

## 2. Transformation inhomogène de la forme

$$\begin{aligned} A_i &\rightarrow A'_i = A_i + a_i \\ H &\rightarrow H' = H + \frac{1}{2i} \sum_j \gamma_j \left( a_j^* A_j - a_j A_j^\dagger \right) + b, \end{aligned} \quad (3.52)$$

avec  $a_i$  des nombres complexes et  $b$  un nombre réel.

Les opérateurs de Lindblad et l'hamiltonien ne sont donc pas univoquement définis par le générateur  $\mathcal{L}$ . Cette liberté dans le choix des lindbladiens permet en particulier, en raison de l'invariance suite à une transformation inhomogène, de choisir des lindbladiens de trace nulle. Par ailleurs, notons que les opérateurs de Lindblad ne sont pas forcément hermitiens [30]. Cette liberté dans le choix des lindbladiens n'est pas avantageuse. Ainsi, pour limiter le nombre de possibilités, il est de coutume de toujours choisir les lindbladiens hermitiens quand cela est possible [30].

De plus, il est aisé de montrer que les constantes positives  $\gamma_k$  ont la dimension inverse d'un temps pourvu que les  $A_k$  soient choisis sans dimension. Ils correspondent en réalité aux taux de relaxations pour les différents modes de désintégration du système ouvert considéré [8]<sup>9</sup>.

Finalement, mentionnons que le résultat de la section précédente a été démontré par Gorini, Kasakowski et Sudarshan [39] en 1976 puis a été étendu à tout espace de Hilbert séparable par Lindblad [23] la même année. Dans cet article, Lindblad suppose notamment que les opérateurs de Lindblad et l'hamiltonien  $H$  sont des opérateurs bornés<sup>10</sup>. Bien que cette hypothèse ne soit pas, en pratique, toujours vérifiée [8], il s'avère que tous les générateurs de semi-groupes dynamiques quantiques connus adoptent bien la structure de Lindblad [8].

### 3.3 Approche microscopique

L'hamiltonien présent dans l'équation de Lindblad (3.49) n'est pas, en règle générale, identifiable à l'hamiltonien libre du système (*i.e.* l'hamiltonien qui décrirait le système  $S$  si ce dernier était isolé). Cette section vise à montrer qu'il est possible de dériver l'équation de Lindblad par une approche *microscopique*. En particulier, cette approche microscopique nous donne l'interprétation correcte de l'hamiltonien apparaissant dans l'équation de Lindblad (3.49).

#### 3.3.1 Schéma d'interaction

Avant de passer à la démonstration à proprement parler, il convient de rappeler succinctement la notion de *schéma d'interaction*. Le schéma d'interaction ou *point de vue d'interaction* est plus général que les célèbres points de vue de Heisenberg et Schrödinger en ce sens que ces deux points de vue peuvent être retrouvés à partir du schéma d'interaction. La plupart des livres de mécanique quantique abordent les différents points de vue; le texte qui suit s'appuie sur les références [2] et [8].

Considérons un système  $S$  décrit par un hamiltonien  $H(t)$ . Nous pouvons décomposer cet hamiltonien en deux parties comme suit:

$$H(t) = H_0 + H_i(t). \quad (3.53)$$

Les deux parties  $H_0$  et  $H_i(t)$  dépendent du système considéré. Cette décomposition s'avère particulièrement utile lorsqu'un système est composé de deux parties. Dans ce cas,  $H_0$ , supposé indépendant du temps, correspond à la somme des énergies de ces deux systèmes *si ces derniers n'interagissent pas entre eux*.  $H_i(t)$  représente alors l'interaction entre ces deux systèmes.

Soit une observable  $A(t)$  de Schrödinger. Sa valeur moyenne  $\langle A \rangle$  est donnée par

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr}[A(t)\rho(t)] = \text{Tr}[A(t)U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)], \quad (3.54)$$

avec  $\rho(t)$  l'opérateur densité décrivant le système  $S$ ,  $U(t_0, t)$  l'opérateur unitaire d'évolution et  $\rho(t_0)$  l'état du système à l'instant  $t_0$ . Les différents points de vue en mécanique quantique ne sont rien d'autre qu'une redéfinition commode des observables et de l'opérateur densité, parfaitement *équivalente*, car la valeur moyenne des observables reste *inchangée*.

En introduisant les deux opérateurs unitaires

$$U_0(t, t_0) \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0(t - t_0)\right), \quad U_I(t, t_0) \equiv U_0(t, t_0)^\dagger U(t, t_0), \quad (3.55)$$

<sup>9</sup>Voir section 3.5.5.

<sup>10</sup>Lindblad suppose en outre que l'indice  $k$  intervenant dans (3.47) balaye un ensemble dénombrable.

la valeur moyenne (3.54) peut se réécrire

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr}[A_I(t)\rho_I(t)], \quad (3.56)$$

où  $A_I(t)$  et  $\rho_I(t)$ , l'observable  $A(t)$  et l'opérateur densité  $\rho(t)$  en schéma d'interaction, sont définis par

$$A_I(t) \equiv U_0^\dagger(t, t_0)A(t)U_0(t, t_0), \quad \rho_I(t) \equiv U_I(t, t_0)\rho(t_0)U_I^\dagger(t, t_0). \quad (3.57)$$

Il est immédiat de vérifier que les points de vue de Heisenberg et Schrödinger correspondent aux cas limites  $H_i = 0$  et  $H_0 = 0$  respectivement.

En introduisant l'hamiltonien d'interaction écrit en schéma d'interaction, noté  $H_I$ , *via*

$$H_I \equiv U_0^\dagger(t, t_0)H_iU_0(t, t_0), \quad (3.58)$$

nous pouvons écrire que  $U_I(t, t_0)$ , l'opérateur d'évolution en schéma d'interaction, est solution de l'équation différentielle

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = H_I(t)U_I(t, t_0) \quad (3.59)$$

avec la condition initiale  $U_I(t_0, t_0) = I$ . L'équation de von Neumann associée à (3.58) s'écrit alors<sup>11</sup>

$$\frac{d}{dt}\rho_I(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_I(t), \rho_I(t)]. \quad (3.60)$$

### 3.3.2 Dérivation microscopique de l'équation de Lindblad

Dérivons l'équation de Lindblad par une approche microscopique. Considérons un système  $S$  faiblement couplé à un environnement  $E$ . L'hamiltonien du système total  $S + E$ , noté  $H_{SE}$  peut s'écrire

$$H_{SE} = H_S + H_E + H_i \quad (3.61)$$

avec  $H_S$  l'hamiltonien agissant uniquement sur le système  $S$ ,  $H_E$  l'hamiltonien agissant uniquement sur l'environnement  $E$  et  $H_i$  l'hamiltonien décrivant l'interaction entre l'environnement et le système.

Nous passons à présent dans le schéma d'interaction. Conformément à la prescription de la section précédente, nous effectuons la transformation unitaire

$$\begin{aligned} \rho &\rightarrow \rho_I = U\rho U^\dagger \\ H_i &\rightarrow H_I = U^\dagger H_i U \end{aligned} \quad (3.62)$$

avec  $U = U(t, t_0) = \exp(-\frac{i}{\hbar}(H_S + H_E)(t - t_0))$ .

L'équation d'évolution de  $\rho_I$  est donnée par l'équation de von Neumann (3.60), dont l'intégration donne<sup>12</sup>

$$\rho_I(t) = \rho_I(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds [H_I(s), \rho_I(s)]. \quad (3.63)$$

Nous venons d'obtenir une expression pour  $\rho_I(t)$  qui peut être injectée dans l'équation (3.60), ce qui donne

$$\frac{d}{dt}\rho_I(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_I(t), \rho_I(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t ds [H_I(t), [H_I(s), \rho_I(s)]]. \quad (3.64)$$

L'opérateur densité qui nous intéresse est l'opérateur densité réduit du système  $S$  en schéma d'interaction  $\rho_{S,I}(t)$ . Pour obtenir son équation d'évolution, il suffit de prendre la trace sur les degrés de liberté de l'environnement de l'équation (3.64). Il vient

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t ds \text{Tr}_E [H_I(t), [H_I(s), \rho_I(s)]] \quad (3.65)$$

où, pour ne pas alourdir les notations, nous avons posé  $\rho_S(t) = \rho_{S,I}(t)$ . Nous avons également supposé que

$$\text{Tr}_E [H_I(t), \rho_I(0)] = 0, \quad (3.66)$$

ce qui revient à supposer que l'état initial est tel qu'il ne génère pas d'interaction avec l'environnement.

<sup>11</sup>Il est facile de s'en persuader, notamment en évaluant la dérivée temporelle de  $\rho_I(t)$  (donnée par (3.57)).

<sup>12</sup>L'instant initial est choisi comme l'origine des temps. Autrement dit, nous avons posé  $t_0 = 0$ .

L'équation (3.65) n'est en rien satisfaisante. En effet, nous aimerions obtenir une équation d'évolution pour  $\rho_S(t)$  ne faisant pas intervenir l'opérateur densité du système total  $\rho_I(t)$ . L'*approximation de Born* [8] permet de contourner cette difficulté. Elle suppose que le couplage entre le système et l'environnement est *faible*. Ainsi, l'opérateur densité de l'environnement  $\rho_E$  n'est que faiblement impacté par l'interaction avec le système. Nous supposons dès lors que  $\rho_I(t)$  admet la forme

$$\rho_I(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_E. \quad (3.67)$$

En injectant l'approximation de Born (3.67) dans l'équation d'évolution (3.65), nous obtenons une équation intégral-différentielle pour  $\rho_S$

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_E]]. \quad (3.68)$$

L'équation (3.68) n'est pas locale: la valeur de  $\rho_S$  à l'instant  $t$  dépend de toutes les valeurs  $\rho_S(s)$  prises pour des temps  $s < t$ . L'*approximation de Markov* consiste dans un premier temps à rendre cette équation locale, *i.e.* à remplacer  $s$  par  $t$  dans l'équation (3.68). Nous obtenons l'équation

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(t) \otimes \rho_E]] \quad (3.69)$$

appelée *équation maîtresse de Redfield* [8]. Si nous appliquons le changement de variable  $s \rightarrow t - s$  à l'équation de Redfield, il vient

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_E]]. \quad (3.70)$$

Le paramètre  $s$  acquiert à présent une signification claire: il représente la quantité temporelle qui permet de tenir compte des effets de mémoire du système. Plus  $s$  est grand, plus nous remontons dans le temps. Or, l'approximation de Markov consiste précisément à négliger les effets de mémoire. Ainsi, la seconde partie de l'approximation markovienne consiste à affirmer qu'il existe un certain temps caractéristique  $\tau_E$  au-delà duquel l'intégrand de (3.70) est négligeable<sup>13</sup>. De façon équivalente et plus prosaïque, cela signifie que la variable  $t$  peut être remplacée par  $\infty$  dans l'équation de Redfield. L'équation maîtresse

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_E]] \quad (3.71)$$

est l'équation d'évolution pour  $\rho_S$  dans le cadre de l'approximation de Born et de l'approximation de Markov, ou, plus simplement, dans le cadre de l'*approximation Born-Markov*.

A ce stade, nous pourrions penser que l'équation (3.71) est équivalente à l'équation maîtresse sous forme de Lindblad. Il n'en est rien. En effet, pour qu'une équation maîtresse puisse être mise sous la forme de Lindblad, il faut (et il suffit) qu'elle génère un semi-groupe dynamique quantique (voir section 3.2). Or, Spohn et Dümcke [38] ont montré sur des cas particuliers que l'équation (3.71) n'assure pas la positivité de la matrice  $(g_{ij})$  apparaissant dans la forme standard (3.43) de l'équation maîtresse. Pour que l'équation (3.71) génère un semi-groupe dynamique quantique, une troisième approximation est nécessaire. Elle porte le nom d'*approximation séculaire*.

Le principe général de l'approximation séculaire, ou RWA pour *rotating wave approximation* est de négliger les termes oscillants rapidement dans (3.71). Considérons que l'hamiltonien d'interaction  $H_i$  (point de vue de Schrödinger) admet la forme

$$H_i = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha}, \quad (3.72)$$

où  $A_{\alpha}$  et  $B_{\alpha}$  sont des opérateurs hermitiques agissant respectivement sur le système et sur l'environnement uniquement. Il s'agit de la forme la plus générale de  $H_i$  [8].

Nous travaillons dans la base des vecteurs propres de l'hamiltonien du système  $H_S$ . Pour faciliter la discussion, nous supposons que le spectre de  $H_S$  est discret. Nous pouvons alors définir un ensemble d'opérateurs par

$$A_{\alpha}(\omega) \equiv \sum_{ab} \delta(\omega_{ba} - \omega) |a\rangle \langle a| A_{\alpha} |b\rangle \langle b|, \quad (3.73)$$

où  $\{\hbar\omega_a, \hbar\omega_b, \dots\}$  et  $\{|a\rangle \langle a|, |b\rangle \langle b|, \dots\}$  sont respectivement les valeurs propres et les projecteurs<sup>14</sup> sur les sous-espaces propres associés de  $H_S$ . La notation  $\delta(\omega_{ba} - \omega)$  désigne une fonction de type

<sup>13</sup>La validité des approximations de cette section est discutée en détail à la section 3.3.4.

<sup>14</sup>En toute généralité, les projecteurs propres s'écrivent  $\sum_i^{g(\hbar\omega_a)} |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$  avec  $g(\hbar\omega_a)$  le degré de dégénérescence de la valeur propre  $\hbar\omega_a$  et  $|\phi_i\rangle$  les vecteurs propres indépendants associés à la valeur propre  $\hbar\omega_a$ .

Kronecker<sup>15</sup>. Autrement dit, l'équation (3.73) comprend une somme sur toutes les énergies  $\hbar\omega_a$  et  $\hbar\omega_b$  telles que leur différence  $\hbar\omega_{ba} = \hbar(\omega_b - \omega_a)$  donne  $\hbar\omega$ . Comme l'hamiltonien  $H_S$  adopte la forme

$$H_S = \sum_c \hbar\omega_c |c\rangle \langle c|, \quad (3.75)$$

nous avons directement

$$\begin{aligned} [H_S, A_\alpha(\omega)] &= \sum_{abc} \delta(\omega_{ba} - \omega) (\hbar\omega_c |c\rangle \langle c|a\rangle \langle a| A_\alpha |b\rangle \langle b| - \hbar\omega_c |a\rangle \langle a| A_\alpha |b\rangle \langle b|c\rangle \langle c|) \\ &= \sum_{abc} \hbar(\omega_a - \omega_b) \delta(\omega_{ba} - \omega) |a\rangle \langle a| A_\alpha |b\rangle \langle b| \\ &= -\hbar\omega A_\alpha(\omega) \end{aligned} \quad (3.76)$$

en utilisant l'orthogonalité des espaces propres associés à des valeurs propres différentes. De façon analogue, il est aisé de montrer que

$$[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)] = +\hbar\omega A_\alpha^\dagger(\omega). \quad (3.77)$$

Nous venons donc de définir un ensemble d'opérateurs  $A_\alpha(\omega)$ , donnés par la projection des opérateurs  $A_\alpha$  sur un espace propre dont la différence en énergie est constante, qui vérifient les relations de commutation (3.76) et (3.77). Ces relations de commutation définissent les *opérateurs propres de  $H_S$* . Ainsi, nous dirons que  $A_\alpha(\omega)$  (respectivement  $A_\alpha^\dagger(\omega)$ ) est opérateur propre de  $H_S$  de valeur propre  $-\hbar\omega$  (respectivement  $+\hbar\omega$ )<sup>16</sup>.

L'intérêt des opérateurs  $A_\alpha(\omega)$  est d'écrire simplement  $H_I$  en schéma d'interaction. En effet, l'opérateur  $A_\alpha(\omega)$  s'écrit en schéma d'interaction

$$A_{\alpha,I}(\omega) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_S t\right) A_\alpha(\omega) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_S t\right) = \exp(-i\omega t) A_\alpha(\omega) \quad (3.78)$$

car  $\exp\left(\frac{i}{\hbar} H_S t\right) |a\rangle = \exp(i\omega_a t) |a\rangle$ . De façon analogue, nous avons

$$A_{\alpha,I}^\dagger(\omega) = \exp(+i\omega t) A_\alpha^\dagger(\omega). \quad (3.79)$$

Nous pouvons à présent déterminer l'expression de  $H_I$ , c'est-à-dire  $H_i$  en schéma d'interaction. Pour ce faire, nous remarquons d'abord que

$$\sum_\omega \delta(\omega_{ba} - \omega) = 1 \quad (3.80)$$

car, évidemment, une seule fréquence  $\omega$  est égale à  $\omega_{ba}$ . Cette dernière relation permet de montrer que

$$\sum_\omega A_\alpha(\omega) = \sum_\omega \sum_{a,b} \delta(\omega_{ba} - \omega) |a\rangle \langle a| A_\alpha |b\rangle \langle b| = A_\alpha = \sum_\omega A_\alpha^\dagger(\omega) \quad (3.81)$$

puisque la base  $|a\rangle$  est complète. Les relations (3.78), (3.79) et (3.81) permettent alors de conclure directement que  $H_I$  s'écrit

$$H_I = \sum_{\alpha,\omega} A_{\alpha,I}(\omega) \otimes B_{\alpha,I}(t) = \sum_{\alpha,\omega} \exp(-i\omega t) A_\alpha(\omega) \otimes B_{\alpha,I}(t) = \sum_{\alpha,\omega} \exp(+i\omega t) A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes B_{\alpha,I}^\dagger(t), \quad (3.82)$$

où les  $B_{\alpha,I}(t)$ <sup>17</sup> sont les opérateurs de l'environnement écrits en schéma d'interaction

$$B_{\alpha,I}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_E t\right) B_\alpha \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_E t\right). \quad (3.83)$$

<sup>15</sup>Explicitement, nous avons

$$\delta(\omega_{ba} - \omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } \omega_{ba} \neq \omega \\ 1 & \text{si } \omega_{ba} = \omega. \end{cases} \quad (3.74)$$

<sup>16</sup>Le concept d'opérateur propre ne doit pas paraître surprenant. En effet, si l'on définit le superopérateur  $\hat{H}_S A = [H_S, A] \quad \forall A$ , il est alors clair que  $A_\alpha(\omega)$  est un vecteur propre de  $\hat{H}_S$  de valeur propre  $-\hbar\omega$ . Un opérateur propre peut toujours être vu comme un vecteur propre dans l'espace de Liouville approprié.

<sup>17</sup>Dans la suite, l'indice  $I$  des  $B_{\alpha,I}(t)$  est omis. Il convient toutefois de garder à l'esprit que ces opérateurs sont écrits en schéma d'interaction lorsqu'ils dépendent explicitement du temps.

En remarquant que l'équation maîtresse (3.71) peut se réécrire comme suit

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho_S(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_E]] \\
&= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t)H_I(t-s)\rho_S(t) \otimes \rho_E - H_I(t)\rho_S(t) \otimes \rho_E H_I(t-s) \\
&\quad - H_I(t-s)\rho_S(t) \otimes \rho_E H_I(t) + \rho_S(t) \otimes \rho_E H_I(t-s)H_I(t)] \\
&= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t-s)\rho_S(t) \otimes \rho_E H_I(t) - H_I(t)H_I(t-s)\rho_S(t) \otimes \rho_E(t)] + \text{c.h.},
\end{aligned} \tag{3.84}$$

où c.h. désigne le conjugué hermitique de l'expression qui précède, la forme particulière de l'hamiltonien d'interaction (3.82) donne l'équation maîtresse

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho_S(t) &= \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\omega, \omega'} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \operatorname{Tr}_E \left[ (e^{-i\omega(t-s)} A_\alpha(\omega) \otimes B_\alpha(t-s)) (\rho_S(t) \otimes \rho_E) (e^{+i\omega' t} A_{\alpha'}^\dagger(\omega') \otimes B_{\alpha'}^\dagger(t)) \right. \\
&\quad \left. - (e^{i\omega t} A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes B_\alpha^\dagger(t)) (e^{-i\omega'(t-s)} A_{\alpha'}(\omega') \otimes B_{\alpha'}(t-s)) (\rho_S(t) \otimes \rho_E) \right] + \text{c.h.} \\
&= \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\omega, \omega'} e^{i(\omega' - \omega)t} (A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega') A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t)) \\
&\quad \left( \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \operatorname{Tr}_E[B_\alpha^\dagger(t) B_{\alpha'}(t-s) \rho_E] \right) + \text{c.h.}
\end{aligned} \tag{3.85}$$

en vertu de la propriété cyclique de la trace. Le facteur

$$\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \exp(i\omega s) \operatorname{Tr}_E[B_\alpha^\dagger(t) B_{\alpha'}(t-s) \rho_E] \tag{3.86}$$

est appelé *tenseur de corrélation spectrale* et correspond à la demi-transformée de Fourier (dans des unités où  $\hbar = 1$ ) des *fonctions de corrélation de l'environnement* définies par

$$G_{\alpha\alpha'}(t, t-s) \equiv \langle B_\alpha^\dagger(t) B_{\alpha'}(t-s) \rangle = \operatorname{Tr}_E[B_\alpha^\dagger(t) B_{\alpha'}(t-s) \rho_E]. \tag{3.87}$$

Les fonctions de corrélation font l'objet de la section 3.3.4. Nous admettons pour l'instant que, si  $\rho_E$  est un état stationnaire de l'environnement, alors l'identité suivante est valable

$$G_{\alpha\alpha'}(t, t') = G(t - t'). \tag{3.88}$$

Dans le cas qui nous occupe, cette identité donne directement

$$G_{\alpha\alpha'}(t, t-s) = G(s). \tag{3.89}$$

Etant donné (3.89), il est clair que les  $\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega, t)$  sont indépendants du temps. Nous les noterons dès lors simplement  $\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  dans la suite.

Nous sommes finalement en mesure d'exploiter l'approximation séculaire. Le développement (3.85) nous permet d'affirmer que l'équation maîtresse d'un système ouvert, dans le cadre de l'approximation de Born-Markov, s'écrit

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\omega, \omega'} e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) (A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega') A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t)) + \text{c.h.} \tag{3.90}$$

L'approximation séculaire consiste en l'omission de tous les termes *non-séculaires*, *i.e.* tels que  $\omega' \neq \omega$ , en raison de l'oscillation rapide de ces derniers. A nouveau, la justification précise de cette approximation est reportée à la section 3.3.4. L'application de l'approximation séculaire à l'équation maîtresse (3.90) donne alors

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\omega} \Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) (A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) - A_\alpha^\dagger(\omega) A_{\alpha'}(\omega) \rho_S(t)) + \text{c.h.} \tag{3.91}$$

Il nous est maintenant possible de retrouver une équation maîtresse sous forme de Lindblad. En premier lieu, nous décomposons les coefficients complexes  $\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  comme suit

$$\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) = \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) + i S_{\alpha\alpha'}(\omega) \tag{3.92}$$

où les termes  $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  et  $S_{\alpha\alpha'}$  sont définis par<sup>18</sup>

$$\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) \equiv \Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) + \Gamma_{\alpha'\alpha}^*(\omega), \quad (3.93)$$

et

$$S_{\alpha\alpha'}(\omega) \equiv \frac{1}{2i}(\Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) - \Gamma_{\alpha'\alpha}^*(\omega)). \quad (3.94)$$

Il est intéressant de remarquer que les termes  $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$  sont les transformées de Fourier des fonctions de corrélation de l'environnement. En effet, en vertu de (3.86), il est aisé de montrer la relation

$$\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(i\omega s) \text{Tr}_E[B_{\alpha}^{\dagger}(t)B_{\alpha'}(t-s)\rho_E]. \quad (3.95)$$

Notons également que les matrices ( $S_{\alpha\alpha'}(\omega)$ ) et ( $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$ ), avec  $\omega$  fixé, définissent des matrices hermitiennes en raison de (3.94) et (3.93).

Ensuite, nous admettons la positivité de la matrice ( $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$ ) à  $\omega$  fixé. La démonstration est une application d'un résultat d'analyse, appelé théorème de Bochner [8].

Enfin, en utilisant la décomposition (3.92) dans (3.91), il vient successivement

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) &= \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\omega} \left( \frac{1}{2}\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) + iS_{\alpha\alpha'}(\omega) \right) (A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t)) \\ &\quad + \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\omega} \left( \frac{1}{2}\gamma_{\alpha\alpha'}^*(\omega) - iS_{\alpha\alpha'}^*(\omega) \right) (A_{\alpha}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha'}^{\dagger}(\omega) - \rho_S(t)A_{\alpha'}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha}(\omega)) \\ &= \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\omega} \left( \frac{1}{2}\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) + iS_{\alpha\alpha'}(\omega) \right) (A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t)) \\ &\quad + \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\omega} \left( \frac{1}{2}\gamma_{\alpha'\alpha}(\omega) - iS_{\alpha'\alpha}(\omega) \right) (A_{\alpha}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha'}^{\dagger}(\omega) - \rho_S(t)A_{\alpha'}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha}(\omega)) \\ &= \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\omega} \left[ \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) \left( A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2}A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t) - \frac{1}{2}\rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha'}(\omega) \right) \right. \\ &\quad \left. - iS_{\alpha\alpha'}(\omega) (A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t) - \rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha'}(\omega)) \right] \end{aligned} \quad (3.96)$$

en faisant usage des propriétés usuelles du conjugué hermitique (première égalité), de l'hermiticité des matrices ( $S_{\alpha\alpha'}(\omega)$ ) et ( $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$ ) (deuxième égalité) et du fait que les indices  $\alpha$  et  $\alpha'$  sont muets (dernière égalité).

Le développement (3.96) nous conduit à une équation maîtresse sous forme standard. En effet, en posant

$$H = \sum_{\omega} \sum_{\alpha\alpha'} \hbar S_{\alpha\alpha'}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega), \quad (3.97)$$

nous obtenons l'équation maîtresse

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho_S(t)] + \sum_{\omega} \sum_{\alpha\alpha'} \gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) \left( A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2}A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t) \right) \quad (3.98)$$

qui est visiblement de la forme (3.43). Comme, en outre, la matrice ( $\gamma_{\alpha\alpha'}(\omega)$ ) est positive et hermitienne, nous savons (voir section 3.2.2) qu'il est possible de mettre (3.98) sous forme de Lindblad.

### 3.3.3 Conclusion et hamiltonien de Lamb shift

Nous venons de montrer qu'il est possible de dériver un générateur d'un semi-groupe dynamique à partir d'une approche microscopique. Le prix à payer pour obtenir un tel générateur est l'imposition de trois approximations: l'approximation de Born, l'approximation de Markov et l'approximation séculaire.

L'équation maîtresse (3.98) permet également, comme annoncé, de clarifier la situation de l'hamiltonien présent dans l'équation de Lindblad (3.49). En effet, ce dernier s'écrit explicitement en schéma d'interaction

$$H = H_{LS} = \sum_{\omega} \sum_{\alpha\alpha'} \hbar S_{\alpha\alpha'}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha'}(\omega), \quad (3.99)$$

<sup>18</sup>Il est immédiat de vérifier que ces définitions font sens en injectant (3.93) et (3.94) dans le membre de droite de (3.92).

et est appelé *hamiltonien de Lamb shift*. Il commute toujours avec l'hamiltonien du système libre  $H_S$ . Pour montrer ce résultat, il nous faut d'abord établir une propriété de commutation des opérateurs  $A_\alpha(\omega)$ . Nous avons

$$[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)A_{\alpha'}(\omega)] = 0. \quad (3.100)$$

En effet, en vertu des propriétés de commutation (3.76) et (3.77), il vient directement

$$[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)A_{\alpha'}(\omega)] = [H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)]A_{\alpha'}(\omega) + A_\alpha^\dagger(\omega)[H_S, A_{\alpha'}(\omega)] = 0. \quad (3.101)$$

Le commutateur entre l'hamiltonien du système libre et l'hamiltonien de Lamb shift s'évalue à présent aisément

$$[H_S, H_{LS}] = \sum_{\omega} \sum_{\alpha\alpha'} \hbar S_{\alpha\alpha'}(\omega) [H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)A_{\alpha'}(\omega)] = 0 \quad (3.102)$$

en raison de la propriété (3.100). Notons finalement que l'hamiltonien de Lamb shift est ainsi nommé parce qu'il conduit à une renormalisation de "type Lamb", *i.e.* une renormalisation des niveaux d'énergie de  $H_S$  en raison d'interactions avec les fluctuations du vide. De plus amples informations peuvent être trouvées dans la référence [8].

### 3.3.4 Fonctions de corrélation et validité des approximations

#### Fonctions de corrélation

Les fonctions de corrélation de l'environnement surviennent naturellement dans la dérivation microscopique de l'équation de Lindblad. Rappelons que nous les avons définies par (*cf.* équation (3.87))

$$G_{\alpha\alpha'}(t, t') \equiv \langle B_\alpha^\dagger(t)B_{\alpha'}(t') \rangle = \text{Tr}_E[B_\alpha^\dagger(t)B_{\alpha'}(t')\rho_E]. \quad (3.103)$$

Ces fonctions jouent un rôle majeur car elles interviennent dans l'expression de l'hamiltonien de Lamb shift (3.99) au travers des quantités  $S_{\alpha\alpha'}(\omega)$ .

Les fonctions de corrélation jouissent d'une propriété importante: si  $\rho_B$  est un état stationnaire de l'environnement, alors nous avons l'égalité

$$G_{\alpha\alpha'}(t, t') = G(t - t'). \quad (3.104)$$

Cette propriété avait été précédemment admise et permettait d'aboutir à la relation (3.89). Nous la démontrons à présent. Par définition, nous pouvons écrire

$$G_{\alpha\alpha'}(t, t') = \text{Tr}_E[B_\alpha^\dagger(t)B_{\alpha'}(t')\rho_E], \quad (3.105)$$

ou encore, en écrivant explicitement les opérateurs  $B_\alpha(t)$ <sup>19</sup>

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}(t, t') &= \text{Tr}_E \left[ \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_E t\right) B_\alpha^\dagger \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_E t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_E t'\right) B_{\alpha'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_E t'\right) \rho_E \right] \\ &= \text{Tr}_E \left[ \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_E t\right) B_\alpha^\dagger \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_E(t-t')\right) B_{\alpha'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_E t'\right) \rho_E \right]. \end{aligned} \quad (3.106)$$

Comme  $\rho_B$  satisfait  $[H_B, \rho_B] = 0$  par hypothèse (état stationnaire de l'environnement), nous obtenons l'expression

$$G_{\alpha\alpha'}(t, t') = \text{Tr}_E \left[ \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_E t\right) B_\alpha^\dagger \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_E(t-t')\right) B_{\alpha'} \rho_E \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_E t'\right) \right], \quad (3.107)$$

ce qui donne finalement

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}(t, t') &= \text{Tr}_E \left[ \exp\left(+\frac{i}{\hbar}H_E(t-t')\right) B_\alpha^\dagger \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_E(t-t')\right) B_{\alpha'} \rho_E \right] \\ &= G_{\alpha\alpha'}(t-t', 0) \equiv G_{\alpha\alpha'}(t-t') \end{aligned} \quad (3.108)$$

en vertu de la propriété cyclique de la trace.

Nous associons à présent aux fonctions de corrélation de l'environnement un temps *typique de décroissance*  $\tau_E$  tel que pour tout  $t > \tau_E$ , les fonctions de corrélation peuvent être négligées. Mathématiquement, l'existence d'un tel temps de décroissance assure que le tenseur de corrélation spectrale  $\Gamma_{\alpha, \alpha'}(\omega)$ , donné par (3.86), est bien défini. Physiquement,  $\tau_E$  représente le temps caractéristique des effets de

<sup>19</sup>Rappelons à nouveau que les opérateurs  $B_\alpha(t)$  sont les opérateurs  $B_\alpha$  écrits en schéma d'interaction et définis par (3.83).

mémoire de l'environnement. En effet, rappelons que les fonctions de corrélations sont contenues dans l'intégrand du second membre de l'équation de Redfield (3.70), réécrite ci-dessous

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_E]], \quad (3.109)$$

avec les notations habituelles de la section précédente et où le paramètre  $s$  est le paramètre temporel tenant compte des effets de mémoire. Dès lors, pour  $s > \tau_E$ , l'intégrand du membre de droite de l'équation de Redfield devient négligeable car, par définition de  $\tau_E$ , les fonctions de corrélation de l'environnement deviennent négligeables. En résumé, nous retiendrons que  $\tau_E$  représente le temps nécessaire à l'environnement pour oublier l'information provenant du système. Dans le cadre markovien qui est le nôtre, il est intuitivement clair que ce temps ne doit pas être "trop grand"; auquel cas les effets de mémoire ne peuvent plus être négligés.

L'existence d'un temps de décroissance  $\tau_E$  pour les fonctions de corrélation de l'environnement n'est pas toujours garantie. Nous admettons que l'existence de  $\tau_E$  est strictement valide si et seulement si l'environnement est infiniment large et contient un continuum de fréquence [8]. L'environnement est souvent modélisé comme une collection infinie d'oscillateurs harmoniques de fréquences continues  $\omega_n$ , et les opérateurs  $B_\alpha$  s'écrivent alors comme des combinaisons linéaires des opérateurs d'échelle associés à ces oscillateurs harmoniques. Pour introduire de la non-markovianité, il suffit par exemple de choisir un environnement constitué d'une collection infinie d'oscillateurs harmoniques avec un spectre discret  $\{\omega_n\}$ . Le cas non-markovien *extrême* est caractérisé par un environnement constitué d'un unique oscillateur harmonique. Ce cas particulier est étudié en détail dans [26].

### L'approximation de Born-Markov

Les approximations de Born et Markov conduisent à l'équation (3.71) qui est markovienne car l'évolution de  $\rho_S(t)$  ne dépend pas de  $\rho_S(s)$  avec  $s < t$ .

Inspectons la validité de ces approximations. A cette fin, nous introduisons un nouveau temps caractéristique  $\tau_R$  appelé *temps de relaxation du système*. Il correspond au temps typique pendant lequel l'état  $\rho_S(t)$  du système change de façon appréciable. Pour cette raison, la dénomination *temps d'évolution* est parfois rencontrée dans la littérature [10].

Par le développement sur les fonctions de corrélation de l'environnement ci-dessus, nous savons que le temps typique de décroissance doit être "petit". Nous pouvons à présent être plus précis: l'équation de Born-Markov est une approximation justifiée si  $\tau_E \ll \tau_R$ . Il nous faut à présent montrer explicitement que cette condition justifie l'approximation de Born et l'approximation de Markov.

Commençons par évaluer l'ordre de grandeur du temps d'évolution  $\tau_R$ . Si nous intégrons l'équation de Redfield (3.109) entre 0 et  $\Delta t$  avec  $\Delta t \gg \tau_E$ , nous obtenons<sup>20</sup>

$$\Delta\rho_S = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} ds \operatorname{Tr}_E[H_I(t'), [H_I(t'-s), \rho_S(t) \otimes \rho_E]] \quad (3.110)$$

avec  $\Delta\rho_S = \rho_S(\Delta t) - \rho_S(0)$ . En appliquant le changement de variable  $t' - s \rightarrow t''$  et en divisant les deux membres par  $\Delta t$ , il vient

$$\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t} = -\frac{1}{\hbar^2 \Delta t} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} dt'' \operatorname{Tr}_E[H_I(t'), [H_I(t''), \rho_S(t) \otimes \rho_E]]. \quad (3.111)$$

En translatant l'origine des temps  $t_0 = 0$  d'une quantité  $t$ , l'équation (3.111) se réécrit

$$\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t} = -\frac{1}{\hbar^2 \Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \operatorname{Tr}_E[H_I(t'), [H_I(t''), \rho_S(t) \otimes \rho_E]], \quad (3.112)$$

avec  $\Delta\rho_S = \rho_S(t + \Delta t) - \rho_S(t)$ . Le taux de variation  $\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t}$  donné par l'équation ci-dessus est appelé *taux de variation granulé de  $\rho_S$*  [10]. Il correspond à la moyenne temporelle du taux instantané  $\frac{d\rho_S}{dt}$  sur un intervalle de temps  $\Delta t \gg \tau_E$ . En effet, ce taux granulé peut se réécrire comme

$$\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \frac{d\rho_S}{dt'}, \quad (3.113)$$

en raison de (3.109). Dès lors, toutes les variations rapides non-markoviennes se produisant pendant l'intervalle de temps  $\Delta t$  sont lissées dans le taux de variation granulé. Ce résultat mène au concept,

<sup>20</sup>Remarquons que nous n'intégrons pas sur  $\rho_S(t)$  car nous voulons conserver une équation locale, comme le préconise l'approximation de Markov.

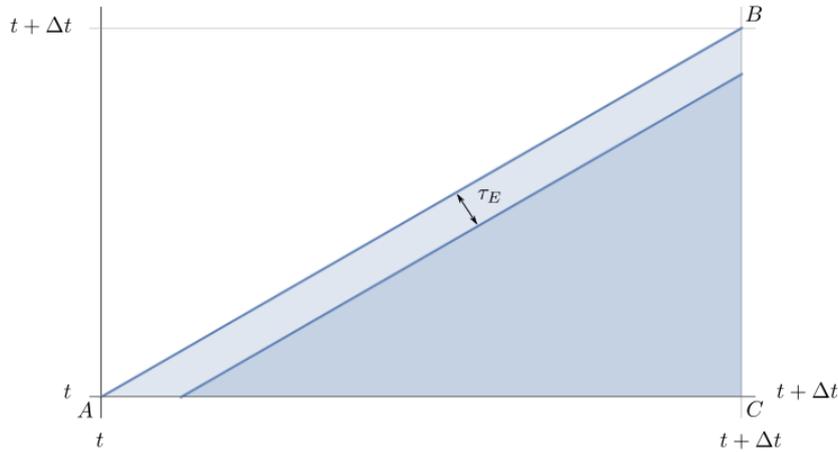


Figure 3.3: Représentation du domaine d'intégration sur  $t'$  et  $t''$  dans (3.112). L'axe vertical (respectivement horizontal) représente la variable  $t''$  (respectivement  $t'$ ). Seule une petite partie (bandelette en bleu clair) du triangle  $ABC$  contribue à la variation du taux de variation granulé donné par (3.112).

développé à la fin de cette section, d'échelle de temps granulée. L'ordre de grandeur du membre de gauche de (3.112) s'évalue sans peine grâce à la définition du temps d'évolution

$$\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t} \sim \frac{\tilde{\rho}_S}{\tau_R}, \quad (3.114)$$

avec  $\tilde{\rho}_S$  l'ordre de grandeur de  $\rho_S(t)$ . Afin d'obtenir l'ordre de grandeur du membre de droite de (3.112), il est commode de remarquer que le domaine d'intégration *effectif* est une bande de largeur  $\tau_E$  proche de la droite  $AB$  d'équation  $t' = t''$  (voir Figure 3.3). En effet, rappelons à nouveau que l'intégrand  $\text{Tr}_E[H_I(t'), [H_I(t''), \rho_S(t) \otimes \rho_E]]$  contient les fonctions de corrélation de l'environnement. Or, comme ces fonctions s'amortissent sur un temps  $\tau_E$  et comme elles ne dépendent que de la différence de leurs arguments, seuls les temps  $t'$  et  $t''$  tels que  $t' - t'' \leq \tau$  contribuent à la variation du taux de variation granulé. Comme sur la droite  $AB$  nous avons  $t' = t''$ , il vient

$$\text{Tr}_E\{[H_I(t'), [H_I(t''), \rho_S(t) \otimes \rho_E]]\} \sim \tilde{\rho}_S g^2, \quad (3.115)$$

où le paramètre

$$g^2 = \langle H_I^2 \rangle_E \equiv \text{Tr}_E(H_I^2 \rho_E) \quad (3.116)$$

caractérise l'intensité du couplage entre le système  $S$  et l'environnement  $E$ . L'ordre de grandeur de la bande proche de la bissectrice  $AB$  représentée sur la Figure 3.3 étant donné par  $\tau_E \Delta t$ , nous avons

$$-\frac{1}{\hbar^2 \Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \text{Tr}_E[H_I(t'), [H_I(t''), \rho_S(t) \otimes \rho_E]] \sim \frac{\tilde{\rho}_S g^2 \tau_E}{\hbar^2}. \quad (3.117)$$

En combinant ce dernier résultat avec l'équation (3.114), l'ordre de grandeur de  $\tau_R$  s'obtient facilement

$$\frac{1}{\tau_R} \sim \frac{g^2 \tau_E}{\hbar^2}. \quad (3.118)$$

L'expression (3.118) nous permet d'exprimer la condition  $\tau_E \ll \tau_R$  sous la forme

$$\frac{g \tau_E}{\hbar} \ll 1. \quad (3.119)$$

Ainsi, imposer  $\tau_E \ll \tau_R$  revient à imposer un couplage  $g$  entre l'environnement et le système de faible amplitude ou, plus précisément, à imposer que l'évolution engendrée par  $H_I$  (de temps caractéristique  $\hbar/g$ ) n'influence que très légèrement le système pendant le temps de relaxation  $\tau_E$ .

Justifions à présent l'approximation de Markov qui, pour rappel, consiste à

1. rendre l'équation maîtresse (3.68) locale dans le temps en remplaçant  $\rho_S(s)$  par  $\rho_S(t)$ ,
2. faire tendre vers l'infini la borne supérieure du membre de droite de l'équation de Redfield (3.70).

Le point 2 est évident vu la définition de  $\tau_E$ . Quant au point 1, il revient à tronquer le développement en série de l'équation (3.68) à l'ordre deux. Un tel développement ne peut se justifier que si les ordres

supérieures sont négligeables par rapport à l'ordre deux. Le terme d'ordre trois fait intervenir trois commutateurs et induit une variation  $\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t}$  donnée par

$$\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \int_t^{t''} dt''' \text{Tr}_E\{[H_I(t'), [H_I(t''), [H_I(t'''), \rho_S(t) \otimes \rho_E]]]\}. \quad (3.120)$$

Pour obtenir l'ordre de grandeur de cette contribution d'ordre trois, nous tenons un raisonnement en tout point analogue à celui tenu pour l'ordre deux. L'intégrand de (3.120) est non nul autour de la droite d'équation  $t' = t'' = t'''$ . Le volume d'intégration *effectif* est tel que l'écart entre deux temps de  $\{t', t'', t'''\}$  ne dépasse pas  $\tau_E$  et son ordre de grandeur est donné par  $\tau_E^2 \Delta t$ . Dès lors, l'ordre de grandeur du terme d'ordre trois est

$$\frac{\tilde{\rho}_{SG}^3 \tau_E^2}{\hbar^3} = \left(\frac{\tilde{\rho}_{SG}^2 \tau_E}{\hbar^2}\right) \frac{g\tau_E}{\hbar}. \quad (3.121)$$

Comme le terme entre parenthèses est l'ordre de grandeur du terme d'ordre deux et comme  $g\tau_E/\hbar$  est petit par hypothèse (*cf.* (3.119)), la contribution de l'ordre trois à la variation de l'état du système  $\Delta\rho_S$  est négligeable sur un laps de temps  $\Delta t \gg \tau_E^{21}$ .

Inspectons finalement la validité de l'approximation de Born. L'approximation de Born postule que l'interaction entre le système  $S$  et l'environnement  $E$  est faible de sorte que

1. l'interaction n'influence presque pas l'état de l'environnement  $\rho_E(t)$ , qui peut donc être considéré comme stationnaire  $\rho_E(t) = \rho_E(0) = \rho_E$ ,
2. l'état du système  $S + E$  en schéma d'interaction se factorise

$$\rho_I(t) \equiv \rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_E. \quad (3.122)$$

Le premier point se justifie sans peine car les excitations de l'environnement engendrées par le système décroissent en un temps  $\tau_E$ . Dès lors, sur un intervalle de temps  $\Delta t \gg \tau_E$ , ces excitations ne sont pas pertinentes. Le deuxième point nécessite une plus grande attention. Sans perte de généralité, nous pouvons décomposer  $\rho(t)$  en deux parties

$$\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_E(t) + \rho_c(t) \quad (3.123)$$

où  $\rho_c(t)$  est la partie intriquée du système total  $S + E$  décrivant la corrélation entre le système  $S$  et l'environnement  $E$ ,  $\rho_S(t) = \text{Tr}_E(\rho(t))$  et  $\rho_E(t) = \text{Tr}_S(\rho(t))$ . La deuxième partie de l'approximation de Born consiste donc à négliger la contribution de  $\rho_c(t)$  à la variation de l'état du système. Supposons que  $\rho_c(t) \neq 0$  et déterminons l'ordre de grandeur de la correction  $\Delta\rho_S = \rho_S(t + \Delta t) - \rho_S(t)$  avec  $\Delta t \gg \tau_E$ . Pour avoir  $\rho_c(t) \neq 0$ , il faut nécessairement qu'au moins une interaction se soit produite à un instant antérieur à  $t$ . Cette interaction génère une variation  $\Delta\rho_S/\Delta t$  du premier ordre qui s'écrit

$$-\frac{i}{\hbar\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \text{Tr}_E[H_I(t'), \rho_S(t) \otimes \rho_E] - \frac{i}{\hbar\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \text{Tr}_E[H_I(t'), \rho_c(t)] \quad (3.124)$$

vu l'équation exacte (3.64). Le premier terme peut être supposé nul grâce à la relation (3.66)<sup>22</sup>. La contribution du deuxième terme peut également être négligée car le terme de corrélation non nul ne peut produire une variation significative directe du taux de variation granulé  $\Delta\rho_S/\Delta t$ <sup>23</sup>. Pour obtenir une variation du taux granulé *a priori* non négligeable, il faut considérer le terme d'ordre deux. Ce terme contribue suite à une interaction antérieure à  $t$  (créant un terme  $\rho_c(t) \neq 0$ ) et une autre interaction se produisant pendant l'intervalle  $[t, t + \Delta t]$  (générant une variation  $\Delta\rho_S(t)$ ). Puisqu'il s'agit d'un terme d'ordre deux, il contient nécessairement un double commutateur qui lui-même contient  $\rho_S(t)$  et les fonctions de corrélation de l'environnement. Dès lors, l'ordre de grandeur de la correction d'ordre deux du taux de variation granulé s'écrit

$$\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t} \sim \frac{-1}{\hbar^2\Delta t} \int_{-\infty}^t dt'' \int_t^{t+\Delta t} dt' \text{Tr}_E(H_I(t'')H_I(t')\rho_E)\rho_S(t) \quad (3.125)$$

avec  $t''$  et  $t'$  deux paramètres temporels permettant de tenir compte respectivement des interactions antérieures à  $t$  et des variations engendrées par les interactions ayant lieu dans l'intervalle  $[t, t + \Delta t]$ .

<sup>21</sup>Les ordres suivants donnent également des contributions négligeables. En effet, la contribution de l'ordre  $n + 1$  ( $n \in \mathbb{N}$ ) fait intervenir un commutateur de plus que l'ordre  $n$  et un domaine d'intégration de dimension  $n + 1$ . Dès lors, il n'est pas difficile de se convaincre que la contribution d'ordre  $n + 1$  est donnée par la contribution d'ordre  $n$  multipliée par le facteur  $g\tau_E/\hbar$ . Ainsi, comme l'ordre 3 est négligeable, les autres ordres le sont aussi par récurrence.

<sup>22</sup>La validité de cette hypothèse est justifiée plus loin.

<sup>23</sup>Notons que la variation  $\Delta\rho_S$  est effectivement *non nulle*. Cependant, elle est *moyennée* sur un temps  $\Delta t$  grand au sens où  $\Delta t \gg \tau_E$ . Par conséquent, sa contribution au taux moyen  $\Delta\rho_S/\Delta t$  est négligeable.

Nous utilisons à nouveau le même argument: comme  $\text{Tr}_E(H_I(t'')H_I(t')\rho_E)$  est négligeable dès lors que  $t' - t'' > \tau_E$ , le domaine d'intégration effectif est donné par deux intervalles de longueur  $\tau_E$ . Ainsi, nous avons

$$\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t} \sim \frac{g^2\tau_E^2\tilde{\rho}_S}{\hbar^2\Delta t} = \left(\frac{\tilde{\rho}_S}{\tau_R}\right) \frac{\tau_E}{\Delta t} \quad (3.126)$$

vu (3.118). Le terme entre parenthèses n'est rien d'autre que l'ordre de grandeur du taux de variation granulé associé à  $\rho_S(t) \otimes \rho_E$  (cf. (3.114)). La contribution issue de  $\rho_c(t)$  est donc négligeable si  $\Delta t \gg \tau_E$ .

En résumé, nous venons de montrer que l'approximation de Born-Markov est pleinement justifiée si

$$\Delta t \gg \tau_E \quad \text{et} \quad \tau_E \ll \tau_R, \quad (3.127)$$

sur une échelle de temps discrète de pas de temps  $\Delta t$ , appelée *échelle de temps granulée*. Or, l'équation (3.71), obtenue dans le cadre de l'approximation de Born-Markov ne fait pas intervenir un taux de variation granulé  $\Delta\rho_S/\Delta t$  mais plutôt un taux instantané  $d\rho_S/dt$ . Pour effectuer le remplacement

$$\frac{\Delta\rho_S}{\Delta t} \rightarrow \frac{d\rho_S}{dt} \quad (3.128)$$

en toute impunité, il faut, en principe, faire tendre  $\Delta t$  vers 0. Ce n'est évidemment pas envisageable en raison de la condition  $\Delta t \gg \tau_E$ . Cependant, nous pouvons tout de même supposer que  $\Delta t$  est tel que

$$\tau_E \ll \Delta t \ll \tau_R. \quad (3.129)$$

La condition (3.129) permet en pratique d'effectuer le remplacement (3.128). En effet, si le pas de temps  $\Delta t$  est bien moins grand que le temps caractéristique d'évolution de  $\rho_S$ , l'échelle de temps granulée paraît continue. L'intervalle de temps  $\Delta t$  n'est alors plus pertinent et seule la condition

$$\tau_E \ll \tau_R \quad (3.130)$$

subsiste. Il faut toutefois garder à l'esprit que la dérivée  $d\rho_S/dt$  n'est pas une "vraie" dérivée en ce sens qu'elle ne fournit pas d'information sur les fluctuations se produisant pendant l'intervalle  $\Delta t$  car ces dernières sont toujours moyennées.

Nous terminons cette section par une remarque sur l'hypothèse (3.66)

$$\text{Tr}_E[H_I(t), \rho_S(0) \otimes \rho_E] = 0. \quad (3.131)$$

Cette hypothèse n'est pas restrictive. En effet, si  $\text{Tr}_E[H_I(t), \rho_S(0) \otimes \rho_E] \neq 0$ , alors il suffit de redéfinir l'hamiltonien d'interaction  $H_I$  comme suit

$$H'_I(t) = H_I(t) - \text{Tr}_E(H_I(t)\rho_E) \otimes I_E \quad (3.132)$$

avec  $I_E$  l'opérateur identité dans l'espace de Hilbert de l'environnement. Le nouvel hamiltonien  $H'_I$  convient car

$$\begin{aligned} \text{Tr}_E\{[H'_I(t), \rho_S(0) \otimes \rho_E]\} &= \text{Tr}_E\{H'_I(t)\rho_S(0) \otimes \rho_E - \rho_S(0) \otimes \rho_E H'_I(t)\} \\ &= \text{Tr}_E\{H'_I(t)\rho_S(0) \otimes \rho_E - \rho_S(0) \otimes \rho_E H'_I(t)\} \\ &\quad - (\text{Tr}_E(H_I(t)\rho_E)\rho_S(0) + \rho_S(0)\text{Tr}_E(H_I(t)\rho_E)) \otimes \rho_E\} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.133)$$

### L'approximation séculaire

L'approximation séculaire néglige les termes non-séculaires pour lesquels  $\omega \neq \omega'$  dans l'expression (3.90) réécrite ci-dessous

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\omega, \omega'} e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\alpha'}(\omega) (A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega')A_{\alpha'}(\omega)\rho_S(t)) + \text{c.h.} \quad (3.134)$$

Afin de comprendre dans quelle mesure ces termes peuvent être négligés, nous introduisons un nouveau temps caractéristique  $\tau_S$ , appelé *temps d'évolution du système libre* [8]. Il décrit l'échelle de temps caractéristique durant laquelle l'état du système *libre* varie de façon appréciable. Par définition,  $\tau_S$  ne dépend pas de l'environnement du système; il est intrinsèque au système  $S$ . L'équivalent de  $\tau_S$  pour un système  $S$  en interaction avec un environnement  $E$  est  $\tau_R$ .

Déterminons l'ordre de grandeur de  $\tau_S$ . Comme les fréquences  $\omega$  sont propres au système  $S$  libre (voir équation (3.75)), nous posons

$$\tau_S \sim \frac{1}{\omega - \omega'}, \quad \omega' \neq \omega. \quad (3.135)$$

Autement dit,  $\tau_S$  est l'inverse de la différence typique entre deux fréquences propres de  $H_S$ .

Si  $\tau_S \ll \tau_R$ , alors les termes non-séculaires oscillent rapidement pendant le temps typique d'évolution du système  $\tau_R$  en raison du facteur  $e^{i(\omega' - \omega)t}$  apparaissant dans (3.134). Par conséquent, ces termes peuvent être négligés car leurs contributions moyennes à la variation de  $\rho_S(t)$  est nulle. Nous retiendrons que l'unique condition

$$\tau_S \ll \tau_R \quad (3.136)$$

justifie l'approximation séculaire.

Notons qu'en optique quantique, les conditions (3.130) et (3.136) sont très souvent respectées [8, 10].

## 3.4 Méthodes stochastiques de résolution de l'équation maîtresse

### 3.4.1 Motivations

L'équation maîtresse de Lindblad (3.49) donne l'évolution temporelle de l'opérateur densité réduit  $\rho_S$  pourvu que les lindbladiens et l'hamiltonien soient connus. Ces derniers sont déterminés par une théorie microscopique appropriée du système et de l'environnement [30]. Une très grande variété de systèmes ouverts a été étudiée dans la littérature, donnant au passage l'expression explicite des lindbladiens et de l'hamiltonien pour ces systèmes. Un nouveau problème se présente alors: la résolution numérique de l'équation maîtresse.

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, il faut encoder le vecteur  $|\psi_S(t)\rangle$  décrivant l'état du système à tout instant  $t$  et appartenant à l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_S$ . Si la dimension de  $\mathcal{H}_S$  est *finie* et vaut  $N$ ,  $2N$  nombres réels sont nécessaires pour stocker n'importe quel ket  $|\psi_S(t)\rangle$  à tout instant. En effet, étant donné une base  $\{u_k\}_{k=1}^N$  orthonormée de  $\mathcal{H}_S$ , nous avons

$$|\psi_S\rangle = \sum_{k=1}^N \langle u_k | \psi_S \rangle |u_k\rangle = \sum_{k=1}^N (c_{k,r} + ic_{k,i}) |u_k\rangle, \quad (3.137)$$

avec  $c_{k,r}$  et  $c_{k,i}$  les parties respectivement réelles et imaginaires des nombres complexes  $\langle u_k | \psi_S \rangle$ . Que se passe-t-il si l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_S$  est de dimension *infinie*? Dans ce cas, il est clair, étant donné la mémoire limitée d'un ordinateur, qu'il est nécessaire de fixer un nombre, notons le encore  $N$ , qui détermine à quel stade on décide de tronquer le vecteur de composante représentant  $|\psi_S\rangle$ . Donc, l'*approximation* du ket  $|\psi_S\rangle$ , *i.e.* le ket réellement entré dans l'ordinateur, requiert encore l'encodage de  $2N$  nombres réels. L'équation maîtresse de Lindblad, quant à elle, représente le système à l'aide d'un opérateur densité  $\rho_S$  et non plus un vecteur d'état. Cet opérateur vit dans l'espace de Liouville, associé à  $\mathcal{H}_S$ , de dimension  $N^2$  (voir section 3.2) avec  $N$  comme défini plus haut. Dès lors, un tel opérateur nécessite *a priori* l'encodage de  $N^2$  nombres complexes. Comme un opérateur densité est positif et de trace unité, il s'avère que  $N^2 - 1$  nombres réels doivent être encodés<sup>24</sup> pour un opérateur  $\rho_S$  donné. Il semble donc intéressant de tenter de "réduire"<sup>25</sup> l'équation de Lindblad, écrite en termes d'opérateur densité, à une équation écrite en termes de vecteurs afin d'optimiser les simulations numériques. Les équations d'évolution que l'on obtient en appliquant cette idée sont alors les équations différentielles stochastiques qui font l'objet de cette section. Elles permettent notamment de simuler des refroidissements par laser, ce qui n'est pas possible en utilisant l'approche de l'équation maîtresse [21].

Les méthodes stochastiques ne sont pas seulement un outil d'optimisation numérique. En effet, la mécanique quantique est souvent présentée comme une théorie d'ensembles car elle prédit les valeurs moyennes, ou *espérances* au sens statistique du terme, d'observables. Ainsi, il faut reproduire un grand nombre de fois, idéalement une infinité de fois, la même expérience avec le système dans le même état quantique pour que la moyenne des résultats de l'expérience rencontre la prédiction. Cependant, les techniques modernes, comme les pièges à ions par exemple, permettent d'observer une réalisation unique d'une expérience à une particule [21]. Il apparaît alors un problème *conceptuel*: comment prédire une réalisation unique de tels systèmes? Les méthodes stochastiques développées dans cette section apportent des éléments de réponse à cette question. La méthode *des sauts quantiques*, en particulier, a initialement été développée pour répondre à ce problème conceptuel dans le cadre de l'*optique quantique* [1]. Dans cette approche, les méthodes stochastiques sont intimement liées aux différents moyens de mesure employés et donc à la *théorie de la mesure* [14].

<sup>24</sup>En effet, la condition d'hermiticité impose  $(\rho)_{ij} = (\rho)_{ji}^*$  pour tout  $i, j = 1, \dots, N$ , ce qui implique directement que

$$\begin{cases} c_{ij,r} &= c_{ji,r} \\ c_{ij,i} &= -c_{ji,i} \end{cases} \quad \forall i, j = 1, \dots, N \quad (3.138)$$

où  $c_{ij,r}$  et  $c_{ji,i}$  sont respectivement la partie réelle et imaginaire de  $(\rho)_{ij}$ . Comme la trace de  $\rho$  doit être égale à l'unité, il est immédiat de conclure que seuls  $N^2 - 1$  nombres réels sont nécessaires pour écrire la matrice hermitienne  $(\rho_{ij})$ .

<sup>25</sup>Comme nous le verrons plus loin, on parle de *unravelling of the master equation* en anglais.

Outre ces deux applications centrales des méthodes stochastiques, il est important de noter qu'elles apparaissent également dans des domaines plus *fondamentaux* comme, par exemple, dans l'élaboration de théories quantiques alternatives [34, 40, 29].

Les différentes méthodes stochastiques donnent naissance à des trajectoires stochastiques (voir chapitre 2), appelées *trajectoires quantiques*. Ainsi, nous parlerons indifféremment de méthodes stochastiques ou méthodes des trajectoires quantiques.

En conclusion, le classement de Wiseman [14] résume de façon claire les trois types d'utilisation des trajectoires quantiques. Premièrement, les trajectoires quantiques peuvent être vues comme de simples outils de résolution numérique et n'ont dès lors pas d'existence propre. Nous dirons que ces trajectoires sont considérées comme *non-réelles*. Ensuite, dans le cadre de la théorie de la mesure, ces trajectoires acquièrent une existence *relative* car elles dépendent des moyens de détection utilisés [14]. Ces trajectoires sont dites *subjectivement réelles* car elles existent mais relativement à une méthode de mesure. Enfin, l'utilisation des trajectoires quantiques dans la formulation de nouvelles théories quantiques induit l'idée que ces trajectoires existent *indépendamment* d'une éventuelle mesure. Wiseman qualifie ces trajectoires d'*objectivement réelles*.

### 3.4.2 Objectif

L'objectif de cette section est de présenter en détail deux méthodes stochastiques de résolution de l'équation maîtresse. Pour chaque méthode, nous démontrerons l'équation différentielle stochastique fournissant les trajectoires quantiques. Ces trajectoires sont ensuite comparées et illustrées sur des exemples relativement simples résolus numériquement. Les codes annotés de ce chapitre sont disponibles dans l'annexe B. Nous ne parlerons que très peu de théories quantiques alternatives, ce qui implique directement que les trajectoires obtenues seront considérées comme non-réelles ou subjectivement réelles. Dans ce cadre, les résultats des simulations seront interprétés et nous montrerons l'*équivalence* entre ces méthodes et la résolution directe de l'équation maîtresse.

### 3.4.3 Unravelling

Les méthodes stochastiques sont ce qu'on appelle des *unravellings* ou *démêlages* de l'équation maîtresse. Introduisons cette notion. L'équation de Lindblad (3.49) ne préserve pas, en règle générale, la pureté d'un état initial [4]

$$\rho_0 = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|. \quad (3.139)$$

L'état initial évolue alors en un état mixte qui peut s'écrire

$$\rho(t) = \sum_{\xi} p_{\xi} |\psi_{\xi}(t)\rangle\langle\psi_{\xi}(t)| \equiv \mathbb{E}(|\psi_{\xi}(t)\rangle\langle\psi_{\xi}(t)|), \quad (3.140)$$

avec  $p_{\xi} \geq 0$  et  $\sum_{\xi} p_{\xi} = 1$  et  $\mathbb{E}$  désigne la *moyenne d'ensemble*, *moyenne statistique* ou encore *espérance* sur  $\xi(t)$  de  $|\psi_{\xi}(t)\rangle\langle\psi_{\xi}(t)|$ . Choisissons un ensemble d'états  $|\psi_{\xi}(t)\rangle = |\psi(\xi(t), t)\rangle$  solution de l'équation d'Itô générale<sup>26</sup>

$$|d\psi\rangle = |a\rangle dt + |b\rangle d\mu(t), \quad (3.141)$$

où  $d\xi(t)$  peut être une différentielle du mouvement brownien, une différentielle de saut ou les deux. Une solution de cette équation différentielle stochastique  $|\psi(\xi(t), t)\rangle$  pour une réalisation de  $\xi(t)$  décrit une trajectoire dans l'espace de Hilbert qui, comme déjà mentionné, s'appelle une *trajectoire quantique*. L'ensemble de toutes les solutions  $|\psi(\xi(t), t)\rangle$  pour toutes les fluctuations  $\xi(t)$  est appelé *unravelling* si la moyenne d'ensemble de ces solutions produit un opérateur densité (3.140) solution de l'équation de Lindblad (3.49).

Comme nous savons que la décomposition (3.140) n'est pas unique (*cf.* chapitre 1), plusieurs ensembles  $\{p_{\xi}, |\psi(\xi(t), t)\rangle\}$  peuvent conduire au même opérateur densité  $\rho$  une fois la moyenne statistique effectuée. Cette ambiguïté génère les différents *unravellings* présentés dans cette section. Notons que la dépendance en  $\xi(t)$  est omise dans la suite pour ne pas alourdir les équations. Nous noterons  $|\psi(\xi(t), t)\rangle = |\psi(t)\rangle$ .

### 3.4.4 Diffusion de l'état quantique - QSD

#### Introduction

La première méthode porte le nom de *diffusion de l'état quantique* ou *Quantum State Diffusion (QSD)* en anglais. Elle a été introduite par Percival et Gisin en 1992 dans l'article [31]. La démonstration présentée ci-dessous s'inspire de celle de l'article original et du livre de Percival [30].

<sup>26</sup>Cette équation est introduite dans la section suivante. Notons qu'il peut y avoir plusieurs perturbations, auquel cas une somme sur toutes ces perturbations apparaît dans l'équation (3.141) (voir section suivante).

### Démonstration

Considérons un système ouvert  $S$  markovien dont l'évolution de son opérateur densité  $\rho_S(t)$  est donnée par l'équation de Lindblad

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho_S(t)] + \sum_{k=1}^{N^2-1} L_k \rho_S(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2} L_k^\dagger L_k \rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t) L_k^\dagger L_k \quad (3.142)$$

avec les notations habituelles. L'idée est de déterminer l'expression d'une équation différentielle stochastique dont les solutions  $|\psi(t)\rangle$  sont telles que l'opérateur

$$\rho(t) = \mathbb{E} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \quad (3.143)$$

donne bien un opérateur densité satisfaisant l'équation de Lindblad (3.142).

Nous commençons par considérer un *système ouvert élémentaire*, i.e. un système complètement ouvert avec un seul lindbladien. L'équation maîtresse d'un tel système est un cas particulier de (3.142)

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = L\rho_S(t)L^\dagger - \frac{1}{2}L^\dagger L\rho_S(t) - \frac{1}{2}\rho_S(t)L^\dagger L. \quad (3.144)$$

Rappelons qu'une équation différentielle stochastique adopte la forme générale<sup>27</sup>

$$dX(t) = a(X(t), t)dt + b(X(t), t)d\mu(t), \quad (3.145)$$

où  $d\mu(t)$  est soit une différentielle ponctuelle soit une différentielle du mouvement brownien.

Afin d'obtenir un démêlage unique de l'équation maîtresse, Percival et Gisin [30] postulent les quatre conditions suivantes:

1. L'évolution du vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  est *continue*.
2. Le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  reste *normé*.
3. Les différentielles stochastiques  $d\mu(t)$  sont complexes.
4. Les différentielles  $d\mu(t)$  et  $d\mu(t')$  avec  $t \neq t'$  sont statistiquement indépendantes.

Les conditions une, trois et quatre impliquent directement (voir chapitre 2) que la différentielle  $d\mu(t)$  est une différentielle stochastique standard du mouvement brownien complexe. Nous adoptons dès lors la notation consacrée  $d\xi(t)$ . L'équation différentielle stochastique (3.145) est donc une équation différentielle d'Itô du type (voir équation (2.6))

$$|d\psi(t)\rangle = |a\rangle dt + |b\rangle d\xi(t), \quad (3.146)$$

avec  $|d\psi(t)\rangle$  la variation de  $|\psi\rangle$  pendant le temps  $dt$  et les kets  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$  les vecteurs de dérive et de diffusion respectivement. Il est clair que ces deux vecteurs sont les inconnues du problème.

La condition de normalisation donne successivement

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi + d\psi | \psi + d\psi \rangle \\ &= \langle \psi | \psi \rangle + \langle \psi | d\psi \rangle + \langle d\psi | \psi \rangle + \langle d\psi | d\psi \rangle \\ &= 1 + \langle \psi | d\psi \rangle + \langle d\psi | \psi \rangle + \langle d\psi | d\psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.147)$$

où l'on a utilisé à la dernière ligne le fait que  $|\psi\rangle$  est normé. Les produits scalaires de (3.147) s'évaluent facilement en utilisant les règles du calcul d'Itô et l'équation d'Itô (3.146). Nous avons

$$\begin{aligned} \langle d\psi | \psi \rangle &= \langle \psi | d\psi \rangle^* = (\langle a | dt + \langle b | d\xi^* | \psi \rangle \\ &= \langle a | \psi \rangle dt + \langle b | \psi \rangle d\xi^*, \end{aligned} \quad (3.148)$$

$$\begin{aligned} \langle d\psi | d\psi \rangle &= (\langle a | dt + \langle b | d\xi^* | (|a\rangle dt + |b\rangle d\xi) \\ &= \langle b | b \rangle dt. \end{aligned} \quad (3.149)$$

La condition de normalisation (3.147) prend alors la forme

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \psi | d\psi \rangle + \langle d\psi | \psi \rangle + \langle d\psi | d\psi \rangle \\ &= \langle b | b \rangle dt + 2\text{Re}[\langle \psi | d\psi \rangle] \\ &= (\langle b | b \rangle + 2\text{Re} \langle \psi | a \rangle) dt + (2\text{Re} \langle \psi | b \rangle) d\xi_R - (2\text{Im} \langle \psi | b \rangle) d\xi_I \end{aligned} \quad (3.150)$$

<sup>27</sup>Il s'agit de la forme la plus générale d'une équation différentielle stochastique admettant des différentielles de saut ou du mouvement brownien. Il existe d'autres différentielles stochastiques et donc, d'autres équations différentielles stochastiques. Ces autres différentielles ne sont cependant pas utiles dans l'étude des unravellings [14].

avec  $d\xi_R$  et  $d\xi_I$  les parties respectivement réelles et imaginaires de  $d\xi$ . Comme toutes les différentielles sont indépendantes ( $d\xi_R$  et  $d\xi_I$  le sont en raison de la deuxième condition de la définition 5), nous concluons que la condition de normalisation est équivalente à

$$\langle \psi | b \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle b | b \rangle = -2\text{Re} \langle \psi | a \rangle. \quad (3.151)$$

Ainsi, pour assurer la conservation de la norme de  $|\psi\rangle$ , le vecteur  $|b\rangle$  doit être orthogonal à  $|\psi\rangle$  et la norme de  $|b\rangle$  doit respecter la deuxième relation de (3.151).

Comme nous voulons que l'opérateur densité  $\rho = \mathbb{E} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$  satisfasse l'équation de Lindblad (3.144), nous allons déterminer une expression de  $d\rho/dt$  en fonction des éléments clés du problème:  $|\psi\rangle$ ,  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$ . La différentielle  $d\rho$  peut s'écrire

$$\begin{aligned} d\rho &= d[\mathbb{E}(|\psi\rangle \langle \psi|)] \\ &= \mathbb{E}(d(|\psi\rangle \langle \psi|)) \\ &= \mathbb{E}(|d\psi\rangle \langle \psi| + |\psi\rangle \langle d\psi| + |d\psi\rangle \langle d\psi|). \end{aligned} \quad (3.152)$$

L'expression entre parenthèses dans la dernière ligne de (3.152) s'écrit

$$\begin{aligned} |d\psi\rangle \langle \psi| + |\psi\rangle \langle d\psi| + |d\psi\rangle \langle d\psi| &= (|a\rangle dt + |b\rangle d\xi) \langle \psi| + |\psi\rangle (\langle a| dt + \langle b| d\xi^*) \\ &\quad + (|a\rangle dt + |b\rangle d\xi) (\langle a| dt + \langle b| d\xi^*) \\ &= (|a\rangle \langle \psi| + |\psi\rangle \langle a| + |b\rangle \langle b|) dt + |b\rangle \langle \psi| d\xi + |\psi\rangle \langle b| d\xi^*, \end{aligned} \quad (3.153)$$

par les règles habituelles du calcul d'Itô. Comme  $\mathbb{E}d\xi_R = \mathbb{E}d\xi_I = 0$  en raison de la deuxième condition de la définition 5, nous obtenons l'expression de  $d\rho/dt$  désirée

$$\frac{d\rho}{dt} = |a\rangle \langle \psi| + |\psi\rangle \langle a| + |b\rangle \langle b|. \quad (3.154)$$

Nous pouvons à présent déterminer  $|b\rangle$ . Nous considérons à cette fin un opérateur densité initial projetant sur un état pur

$$\rho_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (3.155)$$

avec  $|\psi\rangle$  solution de l'équation différentielle d'Itô (3.146). Les kets  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$  trouvés pour  $\rho_\psi$  conviennent alors également aux opérateurs densités initiaux de la forme générale (3.143) car l'équation de Lindblad est *linéaire*. En multipliant des deux côtés les deux membres de (3.154) par l'opérateur  $I - |\psi\rangle \langle \psi|$  (avec  $I$  l'opérateur identité), il vient

$$(I - |\psi\rangle \langle \psi|) \frac{d\rho}{dt} (I - |\psi\rangle \langle \psi|) = |b\rangle \langle b| \quad (3.156)$$

car les deux premiers termes de (3.154) s'annulent. En effet, nous avons

$$\begin{aligned} (I - |\psi\rangle \langle \psi|) (|a\rangle \langle \psi|) (I - |\psi\rangle \langle \psi|) &= (I - |\psi\rangle \langle \psi|) (|a\rangle \langle \psi| - |a\rangle \langle \psi| \psi\rangle \langle \psi|) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.157)$$

et

$$\begin{aligned} (I - |\psi\rangle \langle \psi|) (|\psi\rangle \langle a|) (I - |\psi\rangle \langle \psi|) &= (|\psi\rangle \langle a| - |\psi\rangle \langle \psi| \psi\rangle \langle a|) (I - |\psi\rangle \langle \psi|) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.158)$$

car  $|\psi\rangle$  est de norme unité. En injectant l'équation de Lindblad (3.144) dans l'expression (3.156) et en remplaçant  $\rho$  par  $\rho_\psi$ , nous obtenons

$$\begin{aligned} |b\rangle \langle b| &= (I - |\psi\rangle \langle \psi|) L \rho_\psi L^\dagger (I - |\psi\rangle \langle \psi|) \\ &= (I - |\psi\rangle \langle \psi|) L |\psi\rangle \langle \psi| L^\dagger (I - |\psi\rangle \langle \psi|) \\ &= (I - |\psi\rangle \langle \psi|) |L\psi\rangle \langle L\psi| (I - |\psi\rangle \langle \psi|) \\ &= (I - |\psi\rangle \langle \psi|) (|L\psi\rangle \langle L\psi| - |L\psi\rangle \langle L\psi| \psi\rangle \langle \psi|) \\ &= |L\psi\rangle \langle L\psi| - |L\psi\rangle \langle \langle L|\psi\rangle| - |\langle L|\psi\rangle\rangle \langle L\psi| + |\langle L|\psi\rangle\rangle \langle \langle L|\psi\rangle| \\ &= |L - \langle L|\psi\rangle\rangle \langle L - \langle L|\psi\rangle|. \end{aligned} \quad (3.159)$$

car les autres termes de l'équation de Lindblad (3.144) s'annulent. En effet, nous avons

$$(I - |\psi\rangle \langle \psi|) L^\dagger L \rho_\psi (I - |\psi\rangle \langle \psi|) = (I - |\psi\rangle \langle \psi|) (L^\dagger L \rho_\psi - L^\dagger L \rho_\psi) = 0 \quad (3.160)$$

et

$$(I - |\psi\rangle \langle \psi|) \rho_\psi L^\dagger L (I - |\psi\rangle \langle \psi|) = (\rho_\psi L^\dagger L - \rho_\psi L^\dagger L) (I - |\psi\rangle \langle \psi|) = 0, \quad (3.161)$$

en utilisant l'idempotence du projecteur  $\rho_\psi$ <sup>28</sup>. L'opérateur  $L_\Delta = L - \langle L \rangle$  apparaît souvent dans la théorie de la diffusion de l'état quantique et est appelé *opérateur  $L$  translaté*. De l'équation (3.159), nous déduisons

$$|b\rangle = uL_\Delta |\psi\rangle, \quad (3.163)$$

avec  $u$  un facteur de phase de l'opérateur  $L$ <sup>29</sup>. Étant donné que le vecteur  $|b\rangle$  intervient devant les fluctuations stochastiques  $d\xi$  dans (3.146) et que ces mêmes fluctuations sont définies par des relations invariantes par multiplication par un facteur de phase (*cf.* définition 5), l'équation d'Itô (3.146) n'est pas affectée par  $u$ . Dès lors, nous posons dans la suite  $u = 1$ .

Il nous reste à déterminer le vecteur  $|a\rangle$ . En multipliant la relation (3.154) par  $|\psi\rangle$ , il vient

$$\frac{d\rho}{dt} |\psi\rangle = |a\rangle + \langle a|\psi\rangle |\psi\rangle, \quad (3.165)$$

vu la condition de normalisation  $\langle \psi|b\rangle = 0$ . Si nous multiplions ensuite les deux membres de cette dernière équation par  $\langle \psi|$ , nous obtenons

$$\left\langle \psi \left| \frac{d\rho}{dt} \right| \psi \right\rangle = \langle \psi|a\rangle + \langle a|\psi\rangle, \quad (3.166)$$

ou encore

$$\operatorname{Re} \langle \psi|a\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \psi \left| \frac{d\rho}{dt} \right| \psi \right\rangle. \quad (3.167)$$

Ce dernier résultat peut être injecté dans (3.165), ce qui donne

$$|a\rangle = \frac{d\rho}{dt} |\psi\rangle - \frac{1}{2} \left\langle \psi \left| \frac{d\rho}{dt} \right| \psi \right\rangle |\psi\rangle + i\alpha |\psi\rangle \quad (3.168)$$

avec  $\alpha$  l'opposé de la partie imaginaire de  $\langle a|\psi\rangle$ . Finalement, l'expression de  $|a\rangle$  est

$$\begin{aligned} |a\rangle &= L |\psi\rangle \langle \psi| L^\dagger |\psi\rangle - \frac{1}{2} L^\dagger L |\psi\rangle \langle \psi|\psi\rangle - \frac{1}{2} |\psi\rangle \langle \psi| L^\dagger L |\psi\rangle - \frac{1}{2} \langle \psi| L |\psi\rangle \langle \psi| L^\dagger |\psi\rangle |\psi\rangle \\ &+ \frac{1}{4} \langle \psi| L^\dagger L |\psi\rangle \langle \psi|\psi\rangle |\psi\rangle + \frac{1}{4} \langle \psi|\psi\rangle \langle \psi| L^\dagger L |\psi\rangle |\psi\rangle + i\alpha |\psi\rangle \\ &= \left( \langle L^\dagger \rangle L - \frac{1}{2} L^\dagger L - \frac{1}{2} \langle L^\dagger \rangle \langle L \rangle + i\alpha \right) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.169)$$

où nous avons utilisé l'équation de Lindblad (3.144), remplacé  $\rho$  par  $\rho_\psi$  et encore utilisé le fait que  $|\psi\rangle$  est normé. Le terme  $i\alpha$  purement imaginaire affecte uniquement la phase de  $|\psi\rangle$ . Il est donc non physique. Pour le moment, nous poserons  $\alpha = 0$ .

Nous connaissons à présent l'expression des deux inconnues  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$  pour un système ouvert élémentaire *via* les équations (3.169) et (3.163) respectivement. L'équation d'Itô recherchée, ou *l'équation QSD élémentaire*, s'écrit

$$|d\psi\rangle = \left( \langle L^\dagger \rangle L - \frac{1}{2} L^\dagger L - \frac{1}{2} \langle L^\dagger \rangle \langle L \rangle \right) |\psi\rangle dt + (L_\Delta \psi) d\xi \quad (3.170)$$

en vertu de (3.146).

Envisageons ensuite le cas d'un système ouvert avec un seul lindbladien  $L$  mais un hamiltonien  $H$  non nul. Pour un tel système, l'équation de Lindblad (3.142) se réduit à

$$\frac{d\rho_S}{dt}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho_S(t)] + L\rho_S(t)L^\dagger - \frac{1}{2} L^\dagger L\rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t)L^\dagger L. \quad (3.171)$$

Intuitivement, il est clair que  $H$  ne doit pas ajouter de terme à  $|b\rangle$  car il ne détermine pas la dynamique stochastique de l'interaction système-environnement. Il est aisé de vérifier cette intuition. En effet, nous avons

$$\begin{aligned} (I - |\psi\rangle \langle \psi|) \left( -\frac{i}{\hbar} [H, \rho_\psi] \right) (I - |\psi\rangle \langle \psi|) &= -\frac{i}{\hbar} ([H, \rho_\psi] - [H, \rho_\psi]\rho_\psi - \rho_\psi[H, \rho_\psi] + \rho_\psi[H, \rho_\psi]\rho_\psi) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.172)$$

<sup>28</sup>Rappelons qu'en toute généralité un projecteur  $p$  sur un espace vectoriel  $E$  est un endomorphisme de  $E$  idempotent, *i.e.*

$$p^2 = p. \quad (3.162)$$

<sup>29</sup>En effet, nous avons

$$|\exp(i\phi)L_\Delta\psi\rangle \langle \exp(i\phi)L_\Delta\psi| = \exp(i\phi) \exp(-i\phi) |L_\Delta\psi\rangle \langle L_\Delta\psi| = |L_\Delta\psi\rangle \langle L_\Delta\psi| \quad (3.164)$$

pour tout  $\phi \in \mathbb{R}$ .

vu la propriété d'idempotence du projecteur  $\rho_\psi$ . L'équation ci-dessus implique que  $H$  ne modifie pas l'expression (3.163) étant donné le développement (3.159). Quant à  $|a\rangle$ , l'existence de l'hamiltonien  $H$  non nul modifie son expression comme suit

$$\begin{aligned} |a^H\rangle &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho_\psi]|\psi\rangle - \frac{1}{2}\langle\psi| - \frac{i}{\hbar}[H, \rho_\psi]|\psi\rangle|\psi\rangle + i\alpha|\psi\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\left(H|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle - |\psi\rangle\langle\psi|H|\psi\rangle - \frac{1}{2}\langle\psi|H|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle|\psi\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|H|\psi\rangle|\psi\rangle\right) + i\alpha|\psi\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}H|\psi\rangle, \end{aligned} \tag{3.173}$$

où  $|a^H\rangle$  est la contribution de l'hamiltonien au ket  $|a\rangle$  et où  $\alpha = -\frac{1}{\hbar}\langle\psi|H|\psi\rangle$ . Cette valeur d' $\alpha$  permet de généraliser<sup>30</sup> le cas où  $H = 0$  et de retomber sur l'équation de Schrödinger si les effets de l'environnement sur le système sont négligeables [31]. Les expressions (3.172) et (3.173) permettent alors directement de conclure que l'équation

$$|d\psi\rangle = \left(-\frac{i}{\hbar}H\right)|\psi\rangle dt + \left(\langle L^\dagger\rangle L - \frac{1}{2}L^\dagger L - \frac{1}{2}\langle L^\dagger\rangle\langle L\rangle\right)|\psi\rangle dt + (L_\Delta\psi)d\xi \tag{3.174}$$

constitue l'équation QSD pour un système ouvert à un seul lindbladien.

Finalement, déterminons l'expression la plus générale de l'équation QSD. Nous considérons donc un système ouvert décrit par l'équation de Lindblad (3.142). La démonstration nécessite un résultat sur les différentielles stochastiques, appelé *règle d'additivité* [30, 28].

Cette règle d'additivité stipule que la contribution de l'hamiltonien et les contributions de *chaque* lindbladien s'additionnent. Autrement dit, admettre cette loi revient à admettre qu'il est toujours possible de définir un *ensemble* de différentielles stochastiques complexes du mouvement brownien tel que défini ci-dessous.

**Définition 11** *Un ensemble  $\{d\xi_j\}$  de différentielles stochastiques complexes est standard s'il vérifie les propriétés suivantes:*

1.  $\mathbb{E}(d\xi_j) = 0$ .
2.  $\Sigma(d\xi_j, d\xi_{j'}) = \mathbb{E}(d\xi_j^* d\xi_{j'}) = \delta_{jj'} dt$ .
3.  $\mathbb{E}(d\xi_j d\xi_{j'}) = 0$ .

En effet, les propriétés 2 et 3 de la définition 11 assurent que, sur un laps de temps  $dt$ , les contributions des lindbladiens s'additionnent et les termes croisés ne jouent aucun rôle. Par exemple, dans le cas de deux lindbladiens, l'équation QSD est *a priori* donnée par

$$\begin{aligned} |d\psi\rangle &= \left(-\frac{i}{\hbar}H\right)|\psi\rangle dt + \sum_{j=1}^2 \left(\langle L_j^\dagger\rangle L_j - \frac{1}{2}L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2}\langle L_j^\dagger\rangle\langle L_j\rangle\right)|\psi\rangle dt + (L_j - \langle\psi|L_j|\psi\rangle)|\psi\rangle d\xi_j \\ &+ \sum_{j \neq j'=1}^2 \left(\langle L_j^\dagger\rangle L_{j'} - \frac{1}{2}L_j^\dagger L_{j'} - \frac{1}{2}\langle L_j^\dagger\rangle\langle L_{j'}\rangle\right)|\psi\rangle d\xi_j^* d\xi_{j'} + \sum_{j,j'=1}^2 (L_j - \langle\psi|L_j|\psi\rangle)|\psi\rangle d\xi_j d\xi_{j'}, \end{aligned} \tag{3.175}$$

où la deuxième ligne est nulle en vertu des propriétés 2 et 3 de la définition 11. Ainsi, l'équation QSD la plus générale est donnée par<sup>31</sup>

$$|d\psi\rangle = \left(-\frac{i}{\hbar}H\right)|\psi\rangle dt + \sum_j \left(\langle L_j^\dagger\rangle L_j - \frac{1}{2}L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2}\langle L_j^\dagger\rangle\langle L_j\rangle\right)|\psi\rangle dt + (L_j - \langle\psi|L_j|\psi\rangle)|\psi\rangle d\xi_j. \tag{3.176}$$

Il nous faut à présent démontrer cette loi d'additivité, ce qui revient à montrer qu'il est toujours possible de trouver un ensemble de différentielles stochastiques standards complexes.

Soit un ensemble de  $K$  différentielles stochastiques  $\{d\mu_k\}$  d'un mouvement brownien complexe, de moyenne nulle et dont les parties imaginaires et réelles sont indépendantes. Ces différentielles doivent respecter la règle du calcul d'Itô:  $|d\xi_k|^2 = dt$ . Elles sont donc entièrement déterminées par

$$\begin{cases} \mathbb{E}d\mu_k &= 0 \quad \forall k = 1, \dots, K \\ \Sigma(d\mu_k, d\mu_{k'}) &= X'_{kk'} dt \quad \forall k, k' = 1, \dots, K, \end{cases} \tag{3.177}$$

<sup>30</sup>L'expression  $\alpha = -\frac{1}{\hbar}\langle\psi|H|\psi\rangle$  généralise bien le cas  $H = 0$  puisque  $\langle\psi|H|\psi\rangle$  est nul si  $H = 0$ .

<sup>31</sup> $\Sigma$  désigne, comme au chapitre 2, l'opérateur covariance.

car les moments d'ordre supérieur s'annulent. La matrice  $(X'_{kk'})$  tient compte du fait qu'on ne peut pas *a priori* exclure la corrélation entre les divers différentielles stochastiques ni même supposer leur indépendance linéaire. La matrice  $(X'_{kk'})$  est hermitienne par définition de la covariance complexe. Il s'ensuit que  $(X'_{kk'})$  est diagonalisable par une matrice unitaire  $(U_{kk'})$

$$X_{jj'} = \sum_{kk'} U_{jk} X'_{kk'} U_{k'j'}^\dagger. \quad (3.178)$$

Dès lors, le nouvel ensemble de différentielles stochastiques  $\{d\xi_j\}$  défini par

$$d\xi_j = \sum_k U_{jk} d\mu_k \quad (3.179)$$

a des covariances pour  $j \neq j'$  nulles par construction. La covariance de deux différentielles peut être vue comme un produit scalaire [30] dont la norme associée est donnée par la variance d'une différentielle stochastique. L'ensemble des différentielles stochastiques  $\{d\xi_j\}$  constitue dès lors un ensemble de fluctuations orthogonales.

Les éléments diagonaux de  $(X_{jj'})$ , *i.e.* les variances des  $d\xi_j$ , peuvent être normés à  $dt$  car ces différentielles stochastiques apparaissent nécessairement devant un coefficient qui, au besoin, peut absorber une constante. Ainsi, l'ensemble  $\{d\xi_j\}$  peut être supposé normé sans perte de généralité.

Si un sous-ensemble de l'ensemble de départ  $\{d\mu_k\}$ , constitué de  $L < K$  éléments, est linéairement dépendant, alors  $L$  variances de l'ensemble  $\{d\xi_j\}$  sont nulles par construction.

Dès lors, nous venons de montrer qu'il est toujours possible de construire  $J = K - L < K$  différentielles stochastiques complexes du mouvement brownien linéairement indépendantes, normées à  $dt$ , et orthogonales pour tout ensemble de  $K$  différentielles stochastiques du mouvement brownien. Comme  $K$  est arbitraire, nous pouvons conclure qu'il est toujours possible de postuler la définition 11, ce qui achève la preuve.

Enfin, nous clôturons cette section en prouvant que  $\rho = \mathbb{E}|\psi\rangle\langle\psi|$ , avec  $|\psi\rangle$  solution de (3.176), obéit à l'équation de Lindblad, *i.e.* nous prouvons que l'équation QSD la plus générale est un unravelling valable<sup>32</sup>. Nous avons

$$\begin{aligned} d\rho_\psi &= d(|\psi\rangle\langle\psi|) = |d\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle d\psi| + |d\psi\rangle\langle d\psi| \\ &= -\frac{i}{\hbar} H \rho_\psi dt + \sum_j \left( \langle L_j^\dagger \rangle L_j - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle \langle L_j \rangle \right) \rho_\psi dt + \sum_j (L_j - \langle L_j \rangle) \rho_\psi d\xi_j \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \rho_\psi H dt + \sum_j \rho_\psi \left( \langle L_j \rangle L_j^\dagger - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle \langle L_j \rangle \right) dt + \sum_j \rho_\psi (L_j^\dagger - \langle L_j^\dagger \rangle) d\xi_j^* \\ &\quad + \sum_j \sum_{j'} (L_{j'} - \langle L_{j'} \rangle) \rho_\psi (L_j^\dagger - \langle L_j^\dagger \rangle) d\xi_{j'} d\xi_j^*. \end{aligned} \quad (3.180)$$

En prenant la moyenne statistique de l'équation ci-dessus, nous retrouvons l'équation de Lindblad car les moyennes se factorisent. Par exemple<sup>33</sup>, pour toute fonction  $f$  non anticipative, *i.e.*  $f$  ne dépend pas de  $t' > t$  à l'instant  $t$ , d'une fluctuation stochastique brownienne complexe  $\xi(t)$ , il vient

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(f(\xi(t))d\xi(t)) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \mathbb{E}(f(\xi(t))(\xi(t + \Delta t) - \xi(t))) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \mathbb{E}(f(\xi(t)))\mathbb{E}(\xi(t + \Delta t) - \xi(t)) \\ &= \mathbb{E}(f(\xi(t)))\mathbb{E}(d\xi(t)) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.181)$$

où nous avons utilisé le fait que  $f(\xi(t))$  et  $\xi(t + \Delta t) - \xi(t)$  sont indépendants en vertu de la non anticipativité de  $f$  et la définition des différentielles du mouvement brownien. Cette propriété est donc vraie en particulier pour  $f = (L_j - \langle L_j \rangle)\rho_\psi$  et  $f = \rho_\psi(L_j^\dagger - \langle L_j^\dagger \rangle)$ . Ainsi, en utilisant la définition 11,

<sup>32</sup>La construction de la preuve de l'équation QSD permet déjà d'affirmer que l'équation QSD est un unravelling. Il est cependant intéressant de le montrer explicitement.

<sup>33</sup>Les moyennes  $\mathbb{E}(f(\xi(t))d\xi_j(t)d\xi_j^*(t))$  se factorisent également par le même argument.

la moyenne statistique de (3.180) donne

$$\begin{aligned}
d\rho &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho]dt + \sum_j \left( \langle L_j^\dagger \rangle L_j - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle \langle L_j \rangle \right) \rho dt \\
&+ \sum_j \rho \left( \langle L_j \rangle L_j^\dagger - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle \langle L_j \rangle \right) dt + \sum_j \sum_{j'} (L_{j'} - \langle L_{j'} \rangle) \rho (L_j^\dagger - \langle L_j^\dagger \rangle) \mathbb{E}(d\xi_{j'} d\xi_j^*) \\
&= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho]dt + \sum_j \left( \langle L_j^\dagger \rangle L_j - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle \langle L_j \rangle \right) \rho dt \\
&+ \sum_j \rho \left( \langle L_j \rangle L_j^\dagger - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle \langle L_j \rangle \right) dt + \sum_j (L_j - \langle L_j \rangle) \rho (L_j^\dagger - \langle L_j^\dagger \rangle) dt \\
&= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)]dt + \sum_j \left( L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j \rho - \frac{1}{2} \rho L_j^\dagger L_j \right) dt.
\end{aligned} \tag{3.182}$$

La moyenne d'ensemble de  $d\rho_\psi$  permet donc bien de retrouver, en moyenne statistique, l'équation de Lindblad.

### Commentaires

Nous avons obtenu que l'équation QSD

$$|d\psi\rangle = \left( -\frac{i}{\hbar} H \right) |\psi\rangle dt + \sum_j \left( \langle L_j^\dagger \rangle L_j - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2} \langle L_j^\dagger \rangle \langle L_j \rangle \right) |\psi\rangle dt + (L_j - \langle \psi | L_j | \psi \rangle) |\psi\rangle d\xi_j. \tag{3.183}$$

relative à un système ouvert  $S$ , obéissant à l'équation de Lindblad (3.142), constitue l'unique unraveling, écrit en termes de différentielles stochastiques complexes du mouvement brownien, tel que  $|\psi(t)\rangle$ , (solution de (3.183)) soit continu et normé.

Avant de passer aux diverses simulations de l'équation QSD, il est intéressant de s'attarder sur ses propriétés. D'abord, l'équation (3.183), contrairement à l'équation de Lindblad, est non-linéaire car les termes

$$\langle L_j \rangle = \langle \psi | L_j | \psi \rangle \tag{3.184}$$

dépendent quadratiquement de  $|\psi\rangle$ .

Ensuite, l'équation QSD est *non-locale*. En effet, supposons qu'il n'y ait qu'un seul lindbladien  $L = \hat{x}$  avec  $\hat{x}$  l'opérateur position. Dans ce cas particulier, les termes (3.184) s'écrivent

$$\langle L \rangle (t) = \langle \hat{x} \rangle (t) = \int dx |\psi(x, t)|^2 x, \tag{3.185}$$

par définition de la valeur moyenne d'un opérateur en mécanique quantique. Dès lors, pour un point  $x'$  donné, la valeur de  $\psi(x', t + dt)$  définie par

$$\psi(x', t + dt) \equiv \langle x' | \psi(t + dt) \rangle = \langle x' | \psi(t) \rangle + \langle x' | d\psi \rangle, \tag{3.186}$$

dépend nécessairement de toutes les valeurs  $\psi(x, t)$  à  $t$  fixé et ce, indépendamment de l'écart entre  $x$  et  $x'$  car le terme  $\langle x' | d\psi \rangle$  contient  $\langle \hat{x} \rangle$  donné par (3.185). Cette non-localité pose des problèmes de causalité dans le cadre de la généralisation relativiste des équations QSD [30].

Enfin, insistons sur la différence de *nature* entre l'équation QSD (3.183) et l'équation maîtresse sous forme de Lindblad (3.142). La première est une équation différentielle *stochastique* alors que la seconde est une équation différentielle standard. Si les conditions initiales de l'équation de Lindblad sont connues, alors  $\rho(t)$  est déterminé sans ambiguïté pour tout temps  $t$ . Au contraire, l'équation QSD donne naissance à une pléthore de trajectoires différentes pour *la même condition initiale*.

## 3.4.5 Simulations

### Introduction

Cette section présente trois exemples simples illustrant les propriétés de l'équation QSD (3.183). Nous admettons la forme des lindbladiens et nous nous intéressons moins à la physique sous-jacente qu'à l'illustration de l'équation QSD. Les exemples choisis sont des cas classiques d'optique quantique et sont généralement discutés à partir de l'équation de Lindblad (3.142). La dérivation explicite des lindbladiens de cette section est disponible dans la référence [8].

L'équation QSD peut être simulée de deux façon différentes. D'une part, un petit nombre de trajectoires peut être envisagé. Dans ce cas, les simulations permettent de mieux comprendre un système physique et les trajectoires s'apparentent aux résultats qu'un expérimentateur pourrait obtenir sur quelques essais. D'autre part, si la simulation comporte un grand nombre de trajectoires, la moyenne d'une observable sur ces mêmes trajectoires permet de rencontrer les prédictions de l'équation maîtresse<sup>34</sup> qui, pour rappel, est en général plus gourmande en mémoire.

### Systèmes à deux niveaux et sphère de Bloch

Les simulations de cette section se concentrent sur les systèmes à deux niveaux. Ces systèmes sont de première importance. En effet, ils constituent la pierre angulaire des *ordinateurs quantiques* car, comme les systèmes classiques à deux niveaux, ils peuvent être utilisés pour représenter des nombres binaires [14]. On parle alors de *qubit* pour *quantum bit*. En outre, ils jouent un rôle majeur dans la *théorie de l'information quantique* [14].

Soit un système  $S$  à deux niveaux notés  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$ . Ces niveaux vérifient les relations

$$\langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1, \quad \langle +|-\rangle = 0, \quad (3.187)$$

car les kets  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  sont typiquement les vecteurs propres d'une observable associés à deux valeurs propres différentes. La représentation la plus commode de ces vecteurs est donnée par

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.188)$$

L'espace de Hilbert des états purs du système est sous-tendu par la base orthonormée  $\mathcal{B} = \{|+\rangle, |-\rangle\}$ . Dès lors, dans cette base, l'état  $|\psi\rangle$  (normé) du système admet la forme générale

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle, \quad (\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2 : |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (3.189)$$

Dans la représentation (3.188), l'état  $|\psi\rangle$  se réécrit simplement:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (3.190)$$

avec  $(\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2 : |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Par conséquent, les observables agissant sur  $|\psi\rangle$  doivent être représentées par des matrices  $2 \times 2$  hermitiennes. Il n'est pas difficile de montrer<sup>35</sup> qu'une base de l'espace vectoriel des matrices  $2 \times 2$  hermitiennes est donnée par  $(I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  où  $I$  est la matrice identité à deux dimensions et où les matrices  $\sigma_i$  ( $i = x, y, z$ ) sont les célèbres *matrices de Pauli* définies comme suit

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.192)$$

Introduisons la notion de *sphère de Bloch*. Pour un système à deux niveaux, la représentation matricielle dans la base  $\mathcal{B}$  d'un opérateur densité  $\rho$  quelconque s'écrit

$$(\rho) = \begin{pmatrix} \langle +|\rho|+\rangle & \langle +|\rho|-\rangle \\ \langle -|\rho|+\rangle & \langle -|\rho|-\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (3.193)$$

avec  $(\rho)$  une matrice définie positive et de trace unité. Pour les systèmes à deux niveaux considérés dans cette section, les opérateurs envisagés sont toujours représentés dans la base  $\mathcal{B}$ . Par conséquent, nous identifions les opérateurs et leurs représentations matricielles. En particulier, selon le contexte,  $\rho$

<sup>34</sup>Cette propriété n'est rien d'autre que la définition d'un unravelling de l'équation maîtresse.

<sup>35</sup>En effet, il suffit de réaliser qu'une matrice  $A$  hermitienne  $2 \times 2$  admet toujours la forme

$$A = \begin{pmatrix} a + d & b - ic \\ b + ic & a - d \end{pmatrix}, \quad (3.191)$$

de sorte que  $A = aI + b\sigma_x + c\sigma_y + d\sigma_z$  avec  $(a, b, c, d) \in \mathbb{R}^4$ .

désigne soit un opérateur densité soit sa représentation matricielle dans  $\mathcal{B}$ . Comme la matrice  $\rho$  définie par (3.193) est hermitienne, elle peut être décomposée dans la base  $(I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

$$\rho = aI + b\sigma_x + c\sigma_y + d\sigma_z \quad (3.194)$$

avec  $(a, b, c, d) \in \mathbb{R}^4$ . Etant donné que les matrices de Pauli sont de trace nulle, la constante  $a$  est nécessairement égale à  $\frac{1}{2}$  de sorte que  $\text{Tr}(\rho) = 1$ . Ainsi, l'équation (3.194) se réécrit

$$\rho = \frac{1}{2}(I + 2b\sigma_x + 2c\sigma_y + 2d\sigma_z) \equiv \frac{1}{2}(I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}) \quad (3.195)$$

avec  $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z) \in \mathbb{R}^3$  et  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ . Le vecteur  $\vec{r}$  est appelé *vecteur de Bloch*[18]. En égalant l'expression (3.193) et (3.195), il vient

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + r_z & r_x - ir_y \\ r_x + ir_y & 1 - r_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.196)$$

Dès lors, les composantes du vecteur de Bloch  $\vec{r}$  sont données par

$$\begin{aligned} r_x &= \rho_{12} + \rho_{21} = \text{Tr}(\sigma_x \rho), \\ r_y &= i\rho_{12} - i\rho_{21} = \text{Tr}(\sigma_y \rho), \\ r_z &= \rho_{11} - \rho_{22} = \text{Tr}(\sigma_z \rho). \end{aligned} \quad (3.197)$$

Donc, le vecteur de Bloch s'écrit

$$\vec{r} = (\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle, \langle \sigma_z \rangle). \quad (3.198)$$

avec  $\langle \sigma_i \rangle \equiv \text{Tr}(\sigma_i \rho) \forall i \in \{x, y, z\}$ .

Rappelons que nous avons la relation

$$\text{Tr}(\rho^2) \leq 1 \quad (3.199)$$

pour tout opérateur densité  $\rho$ ; l'égalité ayant lieu si et seulement si  $\rho$  décrit un état pur (cf. chapitre 1). Dans notre cas, cette relation prend la forme

$$\text{Tr}(\rho^2) = r_x^2 + r_y^2 + r_z^2 \leq 1 \quad (3.200)$$

car

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho^2) &= \frac{1}{4} \text{Tr} \left( \begin{pmatrix} 1 + r_z & r_x - ir_y \\ r_x + ir_y & 1 - r_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + r_z & r_x - ir_y \\ r_x + ir_y & 1 - r_z \end{pmatrix} \right) \\ &= r_x^2 + r_y^2 + r_z^2. \end{aligned} \quad (3.201)$$

En résumé, nous venons de montrer que, dans le cas d'un système à deux niveaux, tout opérateur densité admet la forme

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}) \quad (3.202)$$

avec  $\vec{r} = \vec{r} = (\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle, \langle \sigma_z \rangle)$  le vecteur de Bloch satisfaisant l'équation d'une boule à 3 dimensions de rayon 1

$$r_x^2 + r_y^2 + r_z^2 \leq 1. \quad (3.203)$$

Autrement dit,  $\rho$  est en bijection avec la sphère de rayon unité dont l'origine correspond à l'opérateur  $\frac{1}{2}I$ . Cette sphère porte le nom de *sphère de Bloch*. Comme l'égalité (3.200) n'est vraie que dans le cas pur, la surface de la sphère correspond aux états purs alors que l'intérieur de la sphère est associé aux mélanges statistiques d'états.

### Exemple: mesure de la composante $z$ du spin d'un atome

Soit un système  $S$  identifié à un atome de spin  $s = \frac{1}{2}$ . L'état de spin  $|\psi\rangle$  de notre système adopte alors la forme (3.189)

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle, \quad (\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2 : \alpha^2 + \beta^2 = 1, \quad (3.204)$$

avec  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  une base orthonormée formée des vecteurs propres de  $\sigma_z$  de valeurs propres respectives  $\{+1, -1\}$ <sup>36</sup>. Les kets  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  sont naturellement appelés états *spin up* et *spin down*.

L'environnement  $E$  est l'opération de mesure de  $\sigma_z$  qui vient perturber notre système. Nous tenons compte du fait que l'opération de mesure n'est pas instantanée au travers du *temps de mesure*  $\tau_m$  dont

<sup>36</sup>Nous ne considérons pas la constante  $\hbar/2$ .

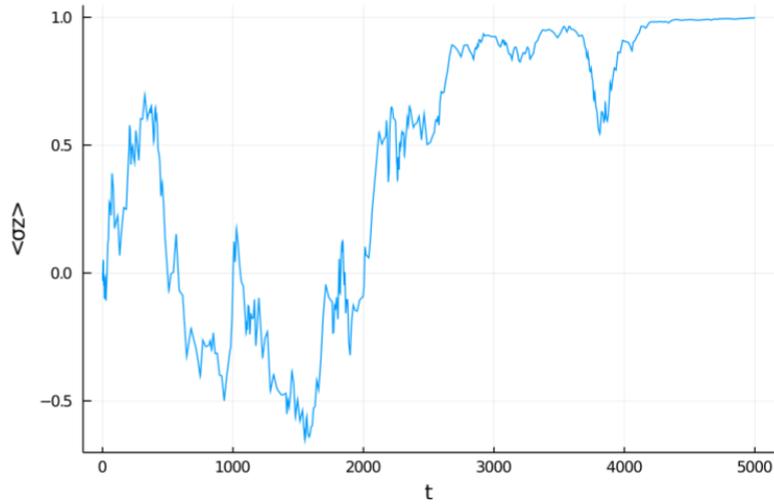


Figure 3.4: Valeur moyenne  $\langle \sigma_z \rangle$  en fonction du temps. La simulation s'effectue sur l'intervalle de temps  $[0, 25]$  avec un pas de temps de 0.005 et  $\gamma_m = 0.09$ . La condition initiale est définie par l'équation (3.206).

l'inverse donne le taux  $\gamma_m$  auquel la mesure est effectuée. Le système  $S$  en contact avec l'environnement  $E$  est alors modélisé en posant

$$H = 0 \quad L = \sqrt{\gamma_m} \sigma_z. \quad (3.205)$$

Par conséquent, nous devons simuler l'équation QSD élémentaire (3.170). Nous choisissons la condition initiale

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle), \quad (3.206)$$

dont le vecteur de Bloch s'écrit

$$\vec{r} = (\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle, \langle \sigma_z \rangle) = (1, 0, 0). \quad (3.207)$$

La figure 3.4 illustre le caractère continu et diffusif des trajectoires QSD. La valeur  $\langle \sigma_z \rangle$  varie d'abord de façon stochastique puis converge vers un des deux résultats de mesure permis:  $\langle \sigma_z \rangle = +1$  ou  $\langle \sigma_z \rangle = -1$ , correspondant aux états  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  respectivement. Dans le cas particulier de la trajectoire de la figure 3.4, le résultat de mesure est  $\langle \sigma_z \rangle = +1$ .

La figure 3.5 montre la trajectoire de l'opérateur densité  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  avec  $|\psi\rangle$  solution de l'équation QSD élémentaire (3.170) pour la même trajectoire que celle de la figure 3.4. L'opérateur  $\rho$  démarre au point  $(1, 0, 0)$ , à équidistance des pôles nord et sud qui correspondent aux états  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$ . Il diffuse ensuite jusqu'au pôle nord.

Vu la condition initiale (3.206), il est clair que les résultats de mesure  $\langle \sigma_z \rangle = +1$  et  $\langle \sigma_z \rangle = -1$  sont équiprobables. La figure 3.6 représente cinq trajectoires *différentes*<sup>37</sup> relatives à la *même condition initiale* (3.206). Trois de ces trajectoires conduisent au résultat de mesure  $\langle \sigma_z \rangle = -1$  tandis que les deux autres donnent  $\langle \sigma_z \rangle = +1$ .

### Exemple: émission spontanée

Nous nous intéressons à présent au phénomène d'émission spontanée. Le système  $S$  à l'étude est un atome à deux niveaux  $\{|e\rangle, |g\rangle\}$  initialement dans l'état excité  $|e\rangle$  et qui se désexcite via l'émission d'un photon pour finir dans l'état fondamental  $|g\rangle$ . A nouveau, l'état le plus général  $|\psi\rangle$  du système est alors de la forme (3.189)

$$|\psi\rangle = \alpha |e\rangle + \beta |g\rangle, \quad (\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2 : \alpha^2 + \beta^2 = 1, \quad (3.208)$$

avec  $\{|e\rangle, |g\rangle\}$  une base orthonormée formée des vecteurs propres de l'hamiltonien du système.

L'environnement est le champ électromagnétique libre modélisé par un unique lindbladien

$$L_1 = \sqrt{\gamma_e} \sigma_-, \quad (3.209)$$

<sup>37</sup>Rappelons qu'étant donné une condition initiale, l'équation QSD (3.176) ne permet pas de déterminer sans ambiguïté l'état  $|\psi\rangle$  pour tout temps  $t$  en raison de sa nature *stochastique*. Elle définit plutôt une infinité de trajectoires.

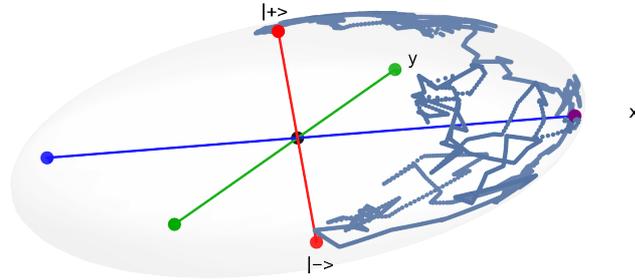


Figure 3.5: Représentation sur la sphère de Bloch de la *même* trajectoire que celle de la figure 3.4. Les axes bleu, vert et rouge indiquent respectivement les axes  $x$ ,  $y$  et  $z$ . Le point de départ, correspondant à la condition initiale (3.206), est représenté en mauve. Les pôles nord et sud correspondent à une mesure spin up et spin down respectivement.

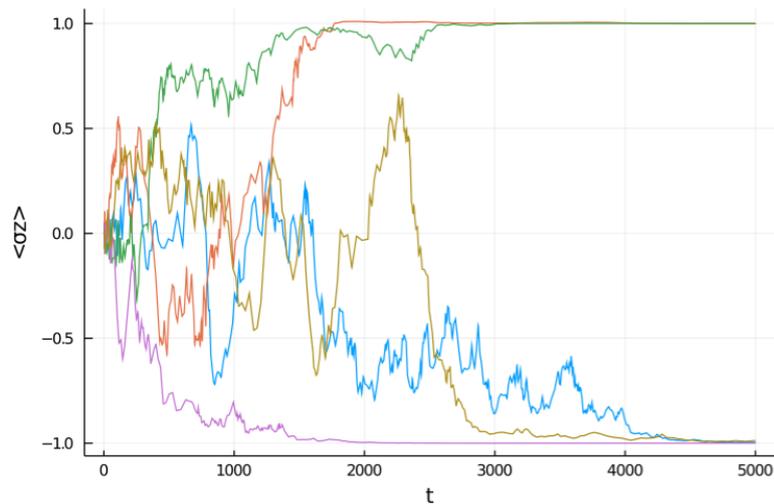


Figure 3.6: Valeur moyenne de  $\langle \sigma_z \rangle$  en fonction du temps pour 5 trajectoires différentes représentées par 5 couleurs différentes pour la *même* condition initiale (3.206). Les paramètres de la simulation sont les mêmes que ceux utilisés pour la figure 3.4.

où  $\gamma_e$  est le taux d'émission spontané de l'atome dans le vide et

$$\begin{aligned}\sigma_- &= \sigma_x - i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_+ &= (\sigma_-)^\dagger = \sigma_x + i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (3.210)$$

L'action des opérateurs  $\sigma_-$  et  $\sigma_+$  sur les éléments de base  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$  s'évalue directement

$$\begin{aligned}\sigma_- |e\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |g\rangle \\ \sigma_+ |g\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |e\rangle \\ \sigma_- |g\rangle &= \sigma_+ |e\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle.\end{aligned}\quad (3.211)$$

Par conséquent,  $\sigma_+$  et  $\sigma_-$  sont des *opérateurs de transition*, permettant de passer de l'état  $|g\rangle$  à l'état  $|e\rangle$  ou de l'état  $|e\rangle$  à  $|g\rangle$  respectivement.

En simulant l'équation QSD élémentaire (3.170) avec l'unique lindbladien donné par (3.209), nous obtenons sans surprise un résultat analogue à celui de l'exemple précédent: l'opérateur  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  (avec  $|\psi\rangle$  solution de (3.170)) diffuse sur la sphère de Bloch du pôle nord (correspondant à l'état excité  $|e\rangle$ ) au pôle sud (correspondant à l'état fondamental  $|g\rangle$ ). La valeur moyenne  $\langle\sigma_z\rangle$ , associée à la même trajectoire, évolue stochastiquement avant de converger vers la valeur  $\langle\sigma_z\rangle = -1$  associé à l'état  $|g\rangle$ . Ces résultats sont illustrés par les figures 3.7 et 3.8. De tels résultats ne sont cependant pas observés en laboratoire ! En effet, expérimentalement, des *sauts quantiques* apparaissent [30]. Ces sauts sont associés à l'émission d'un photon, ce qui permet de compter le nombre de photons émis.

Une trajectoire QSD est censée représenter un résultat typique de laboratoire. Or, nous venons de voir que ce n'est pas le cas pour l'émission spontanée d'un atome dont l'environnement est modélisé par le lindbladien (3.209). Ce désaccord peut être levé en ajoutant un deuxième lindbladien

$$L_2 = \sqrt{\gamma_m}\sigma_z \quad (3.212)$$

qui tient compte de l'*opération de mesure* de  $\sigma_z$  avec le taux  $\gamma_m$ . Dès lors, l'environnement est à présent identifié à l'opération de mesure et au champ électromagnétique ambiant. Dans ce contexte, l'équation QSD qui fait sens n'est plus élémentaire mais contient deux lindbladiens:  $L_1$  et  $L_2$ . Plus le taux de mesure  $\gamma_m$  augmente, plus le graphique de  $\langle\sigma_z\rangle$  s'approche d'un saut quantique (voir figure 3.9). Ces sauts quantiques proviennent d'un autre unravelling, appelé *méthode des sauts quantiques*, qui fait l'objet de la section 3.4.7. En anticipant la suite, nous pouvons affirmer que la méthode des sauts quantiques peut être vue comme un cas limite de l'équation QSD [30]. Dans le cas particulier de l'émission spontanée d'un atome initialement excité, la limite adéquate est  $\gamma_m \rightarrow \infty$ , ce qui correspond à une détection concomitante à l'émission du photon.

Nous clôturons cette étude de l'émission spontanée en déterminant l'évolution de la population de l'état excité  $P \equiv \langle +|\rho_S|+ \rangle$ . En vertu de la relation (3.202), nous avons

$$P = \frac{1}{2}(1 + \langle\sigma_z\rangle). \quad (3.213)$$

En résolvant l'équation maîtresse de Lindblad avec  $L = L_1 = \sqrt{\gamma_e}\sigma_-$ , il est possible de montrer que [18]

$$P = \exp(-\gamma_e t). \quad (3.214)$$

Comme l'équation QSD constitue un unravelling de l'équation maîtresse, la moyenne statistique sur *toutes* les trajectoires de (3.213) est *rigoureusement* égale à l'expression (3.214). Evidemment, les simulations tronquent la moyenne statistique. Cependant, cette dernière converge rapidement vers (3.214), comme le montre la figure 3.10.

### Exemple: superradiance

L'émission spontanée collective d'un ensemble d'atomes a été étudiée pour la première fois par Dicke en 1954 [6]. Dicke a montré que lorsque la distribution atomique est confinée dans un volume "petit" (notion que nous allons préciser), l'intensité rayonnée par l'ensemble d'atomes contient un pic ou pulse qu'il dénomme *pulse superradiant*.

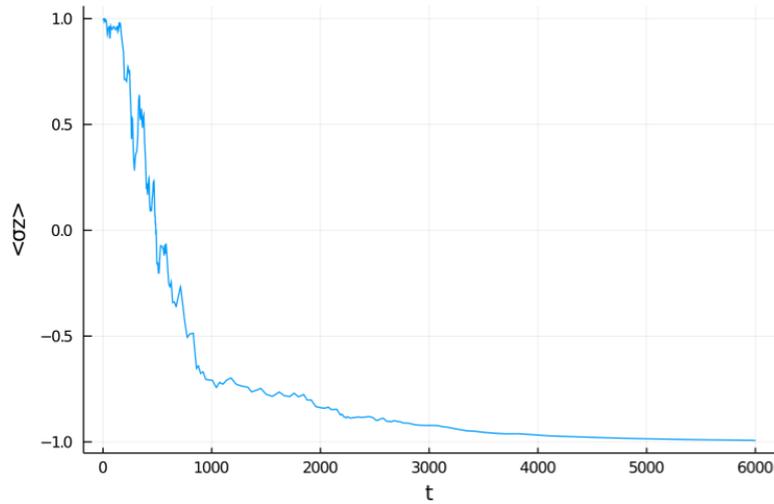


Figure 3.7: Valeur moyenne  $\langle \sigma_z \rangle$  en fonction du temps pour un atome initialement dans l'état  $|e\rangle$ . La simulation s'effectue sur l'intervalle de temps  $[0, 60]$  avec un pas de temps de 0.01 et  $\gamma_e = 0.09$ .

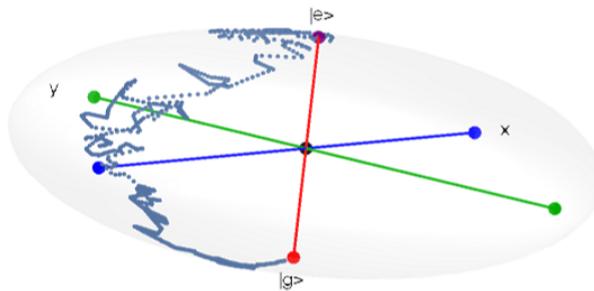


Figure 3.8: Représentation sur la sphère de Bloch de la *même* trajectoire que celle de la figure 3.7. Les axes bleu, vert et rouge indiquent respectivement les axes  $x, y$  et  $z$ . Le point de départ, correspondant à l'état excité  $|e\rangle$ , est représenté en mauve et coïncide avec le pôle nord. Les pôles nord et sud correspondent aux états  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$  respectivement.

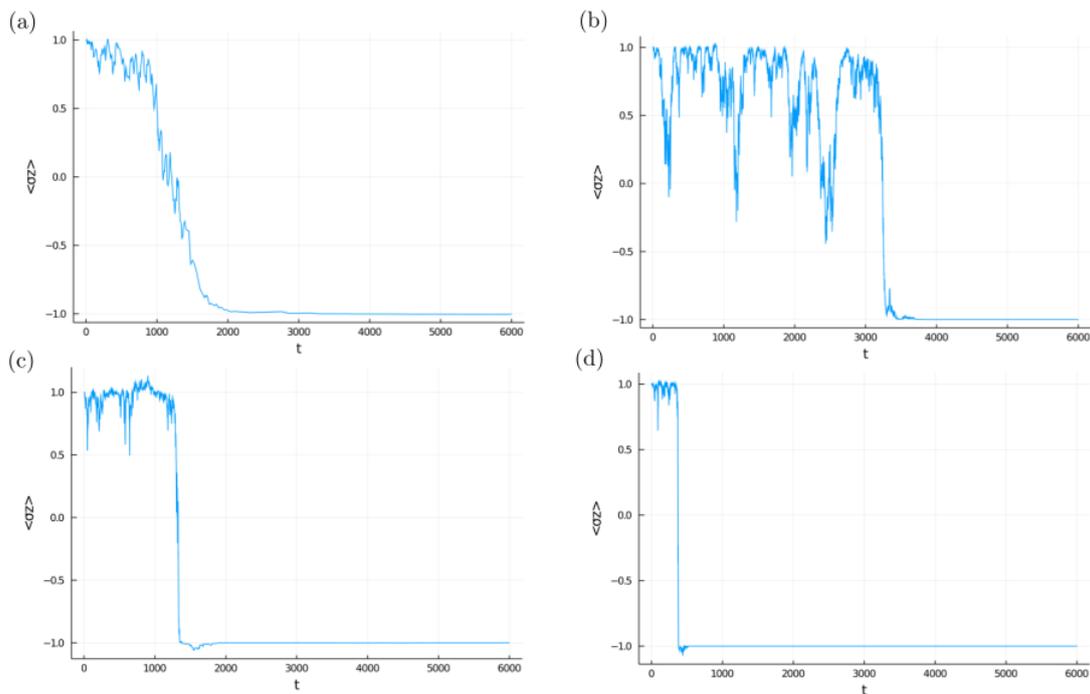


Figure 3.9: Valeur moyenne  $\langle \sigma_z \rangle$  en fonction du temps pour différentes valeurs de  $\gamma_m$  et pour un atome initialement excité. Pour les graphiques (a), (b), (c) et (d),  $\gamma_m^2$  vaut respectivement 0.15, 0.6, 1, 2. Pour tous les graphiques, l'intervalle de temps est  $[0, 60]$  avec un pas de temps de 0.01.

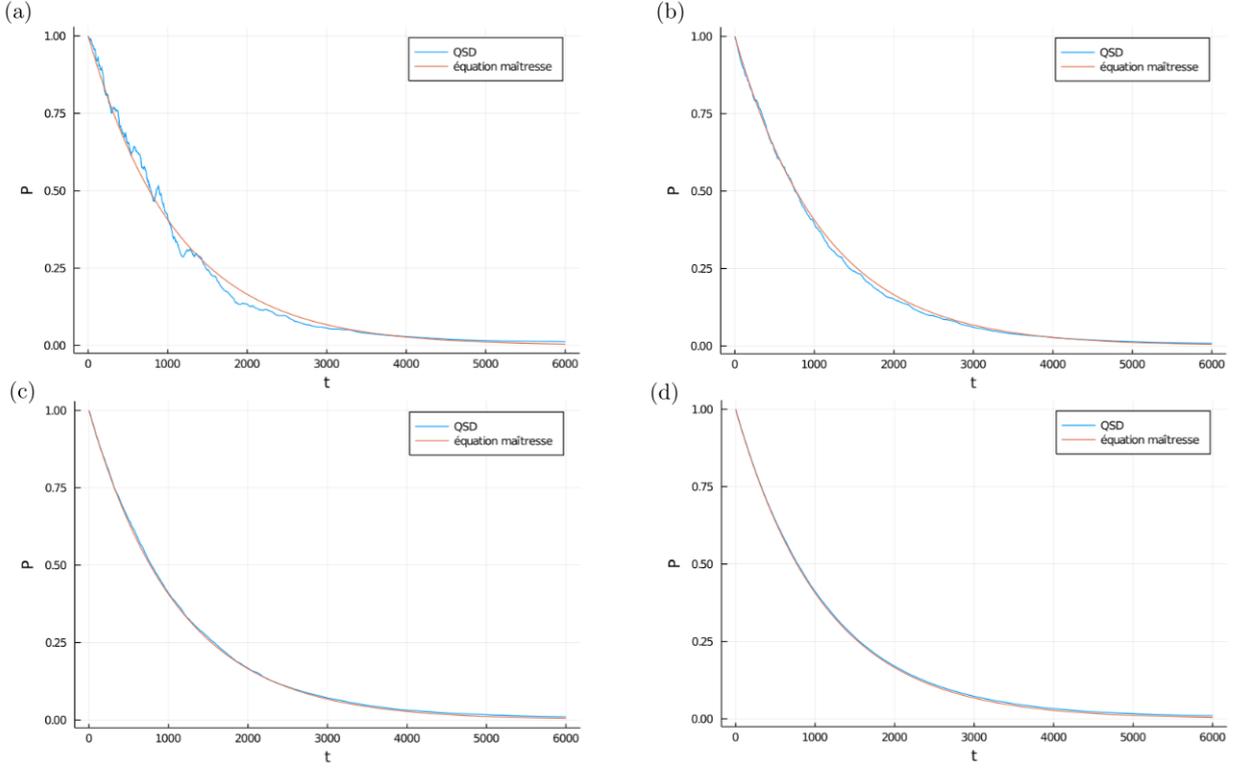


Figure 3.10: Comparaison de l'évolution temporelle de la population de l'état excité  $P = \langle +|\rho_S|+ \rangle$  calculée par moyenne statistique de (3.213) et de l'expression analytique (3.214) provenant de l'équation maîtresse. Les graphiques (a), (b), (c) et (d) considèrent respectivement 10, 100, 1000 et 10000 trajectoires. Pour tous les graphiques, l'intervalle de temps est  $[0, 60]$  avec un pas de temps de 0.01.

Considérons un système  $S$  constitué d'un ensemble de  $N$  atomes identiques à deux niveaux à l'intérieur d'une cavité fortement allongée, *i.e.* la longueur de la cavité est bien plus grande que la longueur caractéristique de sa section. Une telle cavité optique est généralement composée de deux miroirs qui se font face. Comme ces miroirs ont une épaisseur finie, des photons s'échappent de la cavité. Cette fuite de photons est caractérisée par la *taux de décroissance de la cavité*  $\tau$  [18].

L'environnement est identifié au champ électromagnétique quantifié dans le volume  $V$  de la cavité. L'intensité du couplage entre l'environnement et le système est caractérisée par la *constante de couplage*  $g$ . Seul le mode *raisonnant* du champ est considéré, *i.e.* le mode dont la fréquence  $\omega_c$  est telle que

$$\omega_c = \omega_a \quad (3.215)$$

avec  $\omega_a$  la fréquence associée à la transition atomique permise des atomes.

Dans le régime superradiant, *i.e.* lorsque la taille typique  $d$  de la distribution atomique est beaucoup plus petite que la longueur d'onde  $\lambda_a$  de la radiation émise par les atomes ( $d/\lambda_a \ll 1$ ), l'équation maîtresse régissant la dynamique du système n'est pas markovienne. Cependant, pour une cavité à pertes élevées, Bonifacio et Schwendimann<sup>38</sup> [7] ont montré que l'équation markovienne

$$\frac{d\rho_S}{dt} = L\rho_S L^\dagger - \frac{1}{2}\rho_S L^\dagger L - \frac{1}{2}L^\dagger L\rho_S \quad (3.216)$$

est une bonne approximation de la dynamique du système. Le lindbladien  $L$  est donné par

$$L = \sqrt{\gamma_s} \sum_i \Sigma_-, \quad (3.217)$$

où  $\gamma_s \equiv 2g^2/\kappa$  est le *taux superradiant*. Par simplicité, nous prendrons toujours  $\gamma_s = 1$ . L'opérateur  $\Sigma_-$  agit sur l'espace de Hilbert à  $N$  particules  $\mathcal{H}_N = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \dots \otimes \mathcal{H}_1$  avec  $\mathcal{H}_1$  l'espace de Hilbert à une particule. Il est défini par

$$\Sigma_- = \sum_{i=1}^N \sigma_-^i, \quad (3.218)$$

<sup>38</sup>Il ne s'agit pas de la seule approximation réalisée par Bonifacio et Schwendimann. Pour de plus amples informations, le lecteur est renvoyé vers [7].

où  $\sigma_-^i$  est l'opérateur de Pauli  $\sigma_-$  associé à l'atome  $i$  prolongé dans l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_N$ . De façon similaire,  $\Sigma_+$  est défini par<sup>39</sup>

$$\Sigma_+ = \sum_{i=1}^N \sigma_+^i = \Sigma_-^\dagger, \quad (3.219)$$

avec  $\sigma_+^i$  l'opérateur de Pauli  $\sigma_+$  associé à l'atome  $i$  prolongé dans l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_N$ . Ces opérateurs sont la généralisation naturelle à un système de  $N$  systèmes à deux niveaux des opérateurs  $\sigma_+$  et  $\sigma_-$  associés à un unique système à deux niveaux.

Le deuxième résultat fondamental de l'article de Bonafacio et Schwendimann [7] donne l'intensité  $I(t)$  rayonnée par la distribution atomique

$$I(t) = \langle \Sigma_+ \Sigma_- \rangle. \quad (3.220)$$

Nous choisissons la condition initiale

$$|\psi\rangle = |e, e, e, \dots, e\rangle \equiv |e\rangle \otimes |e\rangle \dots \otimes |e\rangle, \quad (3.221)$$

qui correspond à un ensemble de  $N$  atomes initialement excités. Après simulation de l'équation QSD avec le Lindbladien  $L$  donné par (3.217) et la condition initiale ci-dessus, nous obtenons les courbes d'intensité de la figure 3.11. Les pics superradiants apparaissent clairement pour  $N > 1$ . En revanche, dans le cas  $N = 1$ , il n'y a pas de pulse superradiant et nous retrouvons le résultat de l'émission spontanée d'un atome à deux niveaux avec le taux  $\gamma_s$  (voir figure 3.10). Cette constatation provient du fait que la superradiance est un phénomène d'émission *collective*. Notons encore que plus  $N$  augmente, plus le pic superradiant est intense et ténu. Ces résultats *qualitatifs* sont en accord avec les prédictions issues de l'équation maîtresse [7].

Nous terminons cette section en illustrant l'équivalence entre l'équation maîtresse et l'équation QSD sur le cas particulier<sup>40</sup>  $N = 4$  qui admet la solution analytique

$$I(t) = \exp(-6t)(96 + 72t + 4\exp(2t)(-23 + 36t)). \quad (3.222)$$

Cette solution analytique a été déterminée numériquement par résolution de l'équation maîtresse sur *Mathematica* (cf. annexe B).

La figure 3.12 montre que plus le nombre de trajectoires augmente, plus l'accord entre la solution analytique (3.222) et l'intensité déterminée par simulation de l'équation QSD est bon. Notons toutefois que l'accord n'est pas parfait. Ce léger désaccord peut s'expliquer de deux façons différentes. D'une part, rappelons que *mathématiquement* les prédictions de l'équation QSD rencontrent *exactement* les prédictions de l'équation maîtresse que si le nombre de trajectoires tend strictement vers l'infini. Or, numériquement, les moyennes statistiques doivent être tronquées. Ainsi, les solutions obtenues par l'équation maîtresse sont toujours plus précises. D'autre part, l'équation QSD (3.183) est une équation différentielle stochastique *non-linéaire*, ce qui rend la simulation de cette dernière ardue<sup>41</sup>. Dès lors, des erreurs numériques peuvent se glisser dans les simulations. Cette dernière constatation motive l'introduction d'unravellings linéaires. Ces derniers sont brièvement discutés dans la dernière section de ce chapitre.

### 3.4.6 Éléments de la théorie de la mesure

La section 3.5.7 dérive le second unravelling abordé dans ce mémoire en utilisant des résultats de la théorie de la mesure. Cette section introduit succinctement les éléments de la théorie de la mesure nécessaire à la bonne compréhension de la suite.

#### Théorie à variables cachées

Contrairement à la physique classique, les prédictions des résultats de mesure en mécanique quantique sont de nature probabiliste. Même si l'état d'un système quantique est connu avec certitude, les prédictions des résultats de mesure sont des distributions de probabilité. Dès lors, certains physiciens (voir par exemple [13]) ont imaginé l'existence de *variables cachées* qui prédisent de façon certaine les différents résultats observables.

Les théories à variables cachées sont loin de faire l'unanimité dans la communauté scientifique [14] pour au moins deux raisons. D'une part, en 1964, Bell a montré [3] que toute théorie à variables cachée est nécessairement *non-locale*, ce qui signifie qu'un expérimentateur à un certain point de l'espace

<sup>39</sup>La deuxième égalité résulte de l'hermiticité des matrices de Pauli.

<sup>40</sup>Les autres cas peuvent se traiter de façon parfaitement analogue.

<sup>41</sup>Notons que bien que la simulation d'une telle équation n'est pas forcément évidente, elle est néanmoins possible. L'intérêt majeur des unravellings est de pouvoir résoudre numériquement des systèmes qu'il n'est pas possible de résoudre numériquement *via* l'équation maîtresse (cf. section 3.5.1).

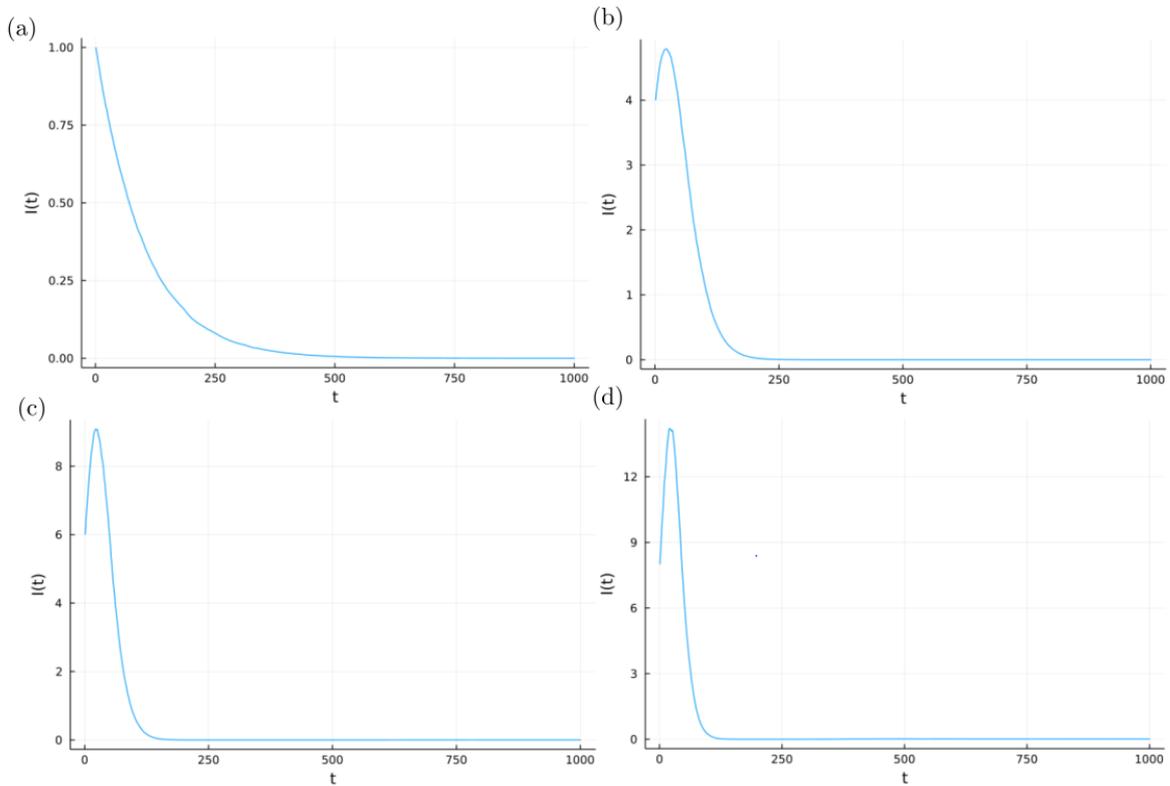


Figure 3.11: Évolution de l'intensité rayonnée par une distribution atomique de  $N$  atomes obtenue par simulation de l'équation QJA avec  $L$  donné par (3.217) et avec la condition initiale (3.221). Les graphiques (a), (b), (c) et (d) correspondent respectivement à un nombre d'atomes  $N$  égale à 1, 4, 6 et 8. Il est important de remarquer la différence d'échelle sur l'axe  $y$  représentant l'intensité  $I(t)$ . Pour tous les graphiques, l'intervalle de temps est  $[0, 10]$ , le pas de temps est 0.01 et la moyenne statistique est prise pour 1000 trajectoires.

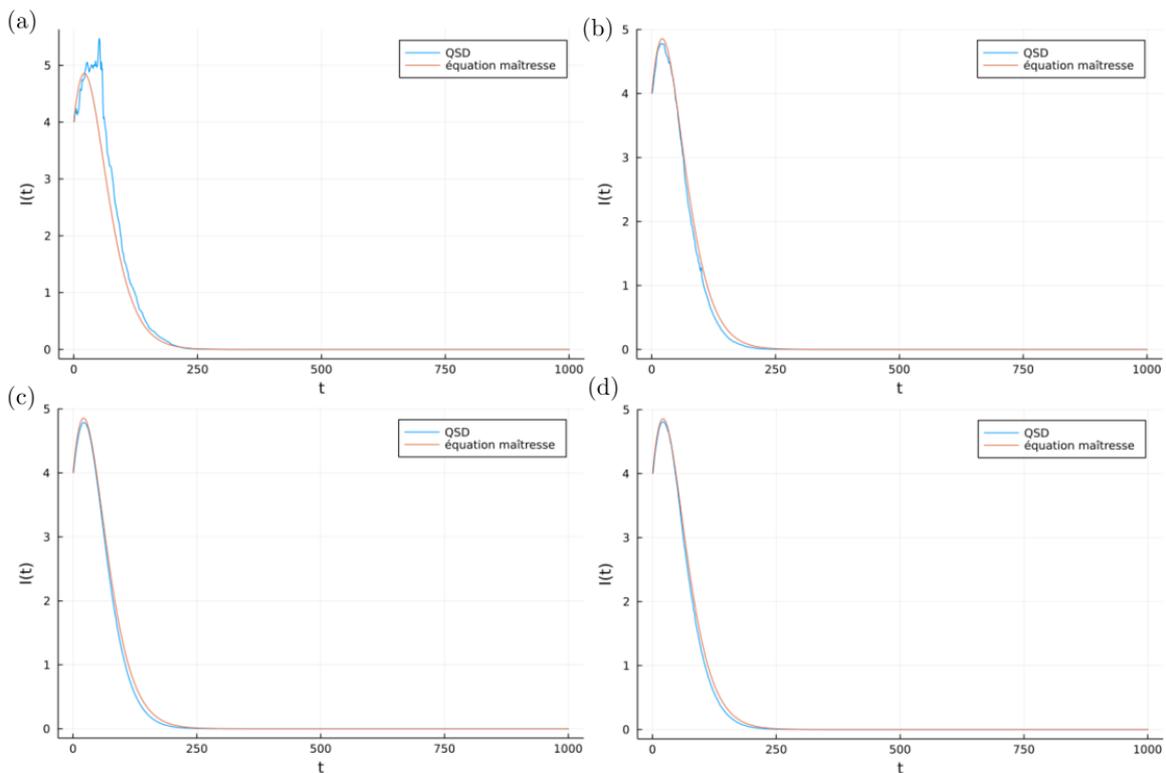


Figure 3.12: Comparaison de la solution analytique (3.222) avec l'intensité obtenue par simulation de l'équation QSD avec  $L$  donné par (3.217) et avec la condition initiale (3.221). Le nombre d'atomes est fixé à 4. Les graphiques (a), (b), (c), (d) correspondent respectivement à 10, 100, 1000, 10000 trajectoires. Pour tous les graphiques, l'intervalle de temps est  $[0, 10]$  et le pas de temps est 0.01.

peut affecter *instantanément* les variables cachées d'un autre point de l'espace arbitrairement loin du premier. Notons toutefois que cette non-localité n'implique pas de problème de causalité car il est possible de montrer [14] qu'aucune information physique ne se transmet à une vitesse supraluminique. Il n'en demeure pas moins que la propriété de non-localité des théories à variables cachées ne s'inscrit pas dans l'esprit d'une théorie relativiste. D'autre part, il n'existe pas une unique théorie à variables cachées mais plutôt une vaste quantité de telles théories [13]. Chaque théorie donne naissance à une interprétation différente des résultats de mesure et il n'existe pas *a priori* une interprétation plus véridique que les autres. Terminons cette discussion par une citation de Gell-Mann [24]: *Quantum mechanics, that mysterious, confusing discipline, which none of us really understands but which we know how to use.*

### Mesures projectives

Nous revenons à présent à une représentation plus "standard"<sup>42</sup> de la mécanique quantique et nous rappelons la notion de *mesure projective*. Soient un système  $S$  et une quantité physique  $\mathcal{A}$ , relative à  $S$ , que nous souhaitons mesurer. Nous lui associons l'*observable*  $A$  qui peut être diagonalisée car, par définition, une observable est un opérateur hermitique.  $A$  peut donc s'écrire

$$A = \sum_{\lambda} \lambda \Pi_{\lambda} \quad (3.223)$$

si le spectre de  $A$ , noté  $\{\lambda\}$ , est discret. Les opérateurs  $\Pi_{\lambda}$  sont les projecteurs sur le sous-espace propre associé à la valeur propre  $\lambda$ . Ils sont donnés par

$$\Pi_{\lambda} = \sum_i^{g_{\lambda}} |\lambda, i\rangle \langle \lambda, i| \quad (3.224)$$

avec  $g_{\lambda}$  le degré de dégénérescence de la valeur propre  $\lambda$ . Comme  $A$  est hermitien, les sous-espaces propres sont orthogonaux

$$\Pi_{\lambda} \Pi_{\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} \Pi_{\lambda}. \quad (3.225)$$

Les résultats (3.223), (3.224) et (3.225) sont des conséquences directes du célèbre *théorème spectral*, valable pour tout opérateur normal<sup>43</sup>. Dans ce contexte, le *postulat de projection* ou *postulat de réduction du paquet d'onde* s'énonce comme suit [14]

**Postulat 1** *Les résultats de mesure possibles de  $\mathcal{A}$  sont donnés par les valeurs propres de  $A$ . La probabilité  $P_{\lambda}$  d'obtenir le résultat  $\lambda$  est*

$$P_{\lambda} = \text{Tr}(\rho(t) \Pi_{\lambda}) \quad (3.226)$$

si la mesure est effectuée au temps  $t$  sur le système  $S$  dans l'état  $\rho(t)$ . L'état conditionné par le résultat  $\lambda$ , i.e. l'état du système juste après la mesure sachant que le résultat  $\lambda$  a été observé, s'écrit

$$\rho_{\lambda}(t + \tau) = \frac{\Pi_{\lambda} \rho(t) \Pi_{\lambda}}{P_{\lambda}} \quad (3.227)$$

avec  $\tau$  la durée de la mesure.

Ainsi, l'état du système est projeté par l'opération de mesure sur l'espace propre associé à la valeur propre  $\lambda$  observée *via* le projecteur  $\Pi_{\lambda}$ . C'est en ce sens que les mesures sont dites projectives.

Si une deuxième opération de mesure sur la quantité  $\mathcal{A}$  est réalisée immédiatement après une première opération donnant le résultat  $\lambda$ , alors le même résultat est garanti. En effet, il s'agit d'une conséquence directe du postulat de projection

$$\begin{aligned} P(\mathcal{A}(t + \tau) = \lambda' | \mathcal{A}(t) = \lambda) &= \text{Tr}(\rho_{\lambda}(t + \tau) \Pi_{\lambda'}) \\ &= \text{Tr} \left( \frac{\Pi_{\lambda} \rho(t) \Pi_{\lambda}}{\text{Tr}(\rho(t) \Pi_{\lambda})} \Pi_{\lambda'} \right) \\ &= \delta_{\lambda\lambda'} \frac{1}{\text{Tr}(\rho(t) \Pi_{\lambda})} \text{Tr}(\Pi_{\lambda} \rho(t) \Pi_{\lambda}) \\ &= \delta_{\lambda\lambda'}, \end{aligned} \quad (3.228)$$

où nous avons utilisé la relation (3.227) (deuxième ligne), l'orthogonalité des sous-espaces propres (3.225) (troisième ligne) et la propriété cyclique de la trace (dernière ligne). Rappelons que la notation

<sup>42</sup>Le qualificatif standard signifie que nous ignorons les théories à variables cachées et traitons la mécanique quantique comme un outil, un algorithme qui permet de prédire de façon probabiliste les résultats de mesure.

<sup>43</sup>Donc, en particulier pour un opérateur hermitien.

$P(\mathcal{A}(t + \tau) = \lambda' | \mathcal{A}(t) = \lambda)$  désigne la probabilité d'obtenir le résultat  $\mathcal{A} = \lambda'$  au temps  $t + \tau$  sachant que le résultat  $\mathcal{A} = \lambda$  a été obtenu au temps  $t$ . Il s'agit de la notion de probabilité conditionnelle introduite au chapitre 2.

Dans le cas particulier d'un état pur  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$ , le postulat de projection adopte une forme simplifiée. L'équation (3.226) se réécrit

$$\begin{aligned}
 P_\lambda &= \sum_i^{g_\lambda} \text{Tr}(|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \lambda, i\rangle \langle \lambda, i|) \\
 &= \sum_{\lambda'} \sum_{i'}^{g_{\lambda'}} \sum_i^{g_\lambda} \langle \lambda', i' | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \lambda, i \rangle \langle \lambda, i | \lambda', i' \rangle \\
 &= \sum_i^{g_\lambda} \langle \psi(t) | \lambda, i \rangle \langle \lambda, i | \psi(t) \rangle \\
 &= \langle \psi(t) | \Pi_\lambda | \psi(t) \rangle \equiv \langle \Pi_\lambda \rangle,
 \end{aligned} \tag{3.229}$$

en évaluant la trace sur la base de vecteurs propres de  $A$ . Quant à l'équation (3.227), elle devient

$$\begin{aligned}
 \rho(t + \tau) &= |\psi(t + \tau)\rangle \langle \psi(t + \tau)| = \frac{1}{P_\lambda} \Pi_\lambda |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \Pi_\lambda \\
 &= \left| \frac{1}{\sqrt{P_\lambda}} \Pi_\lambda \psi(t) \right\rangle \left\langle \frac{1}{\sqrt{P_\lambda}} \Pi_\lambda \psi(t) \right|,
 \end{aligned} \tag{3.230}$$

ce qui implique

$$|\psi(t + \tau)\rangle = \frac{\Pi_\lambda |\psi(t)\rangle}{\sqrt{P_\lambda}}. \tag{3.231}$$

Si  $\mathcal{A}$  est mesuré mais que le résultat de la mesure est ignoré ou inconnu, alors tous les résultats doivent être considérés avec leur probabilité d'occurrence respective. L'état *a posteriori*, *i.e.* après la mesure, d'un tel système est dit *non-conditionné par la mesure* et est défini par

$$\rho(t + \tau) \equiv \sum_\lambda P_\lambda \rho_\lambda(t + \tau) = \Pi_\lambda \rho(t) \Pi_\lambda. \tag{3.232}$$

### Mesures non-projectives

Le concept de mesure projective n'est pas toujours adapté à la situation physique. Du reste, il peut mener à des erreurs. En effet, il existe des systèmes physiques dont l'état n'est pas projeté sur l'espace propre associé à la valeur propre mesurée. Par exemple, si l'opération de mesure consiste à détecter tous les photons d'une cavité, la cavité (*i.e.* le système) est dans l'état du vide à la fin de l'opération de mesure car il n'y a plus de photon dans la cavité. Or, le postulat de projection (en particulier l'équation (3.227)) prédit que le système est dans un état contenant le nombre de photons détectés.

Il est légitime de se demander pourquoi le concept de mesure projective est insuffisant. La raison fondamentale réside dans le fait qu'un expérimentateur ne mesure jamais *directement* le système, mais plutôt l'effet du système sur son environnement. Par exemple, si un expérimentateur observe l'émission spontanée d'un atome, il mesure la radiation émise (effet du système sur l'environnement) par l'atome (le système) suite à son interaction avec le champ électromagnétique ambiant (l'environnement). Cependant, l'expérimentateur n'observe pas directement la radiation émise. La radiation passe au travers d'un photodétecteur, qui induit un courant électrique dans un circuit, qui est relié à un dispositif d'affichage, qui émet de la lumière, qui est détectée par la rétine de l'observateur, ce qui produit un signal neurologique, *etc.* Il est clair qu'il faut couper à un certain endroit cette chaîne de systèmes en appliquant le postulat de projection. Une telle chaîne porte le nom de *chaîne de von Neumann* et la coupe au moyen du postulat de projection est appelée *coupe de Heisenberg* [14]. Cette dernière correspond au point de mesure, *i.e.* à l'endroit où la mesure est considérée comme ayant eu lieu.

Dans le cas de l'émission spontanée d'un atome, si le postulat de projection est appliqué directement sur l'atome, l'équation (3.226) donne de fausses prédictions. Au contraire, si la coupe de Heisenberg est appliquée sur la radiation émise par l'atome, alors les prédictions sont en adéquation avec les résultats expérimentaux. En outre, si la coupe de Heisenberg est placée à une étape ultérieure de la chaîne de von Neumann, les prédictions sont essentiellement<sup>44</sup> identiques à celles déterminées en considérant que la mesure est effectuée directement sur le champ car les objets macroscopiques ont des cohérences<sup>45</sup> qui décroissent rapidement. Le *problème de la mesure quantique* consiste à préciser *après* quelle étape de la

<sup>44</sup>Autement dit, la différence entre les prédictions obtenues suite à une coupe de Heisenberg appliquée sur le champ radié et celles obtenues suite à l'application de la coupe de Heisenberg à n'importe quelle étape ultérieure est négligeable.

<sup>45</sup>Rappelons que les cohérences sont les éléments non-diagonaux de la matrice densité.

chaîne de von Neumann la coupe de Heisenberg peut être effectuée afin de rendre compte des mesures. La théorie de la mesure et l'étude de la décohérence permettent de déterminer l'étape à laquelle la coupe de Heisenberg doit être considérée. Pour plus d'informations sur le lien entre décohérence et théorie de la mesure, nous renvoyons le lecteur vers le troisième chapitre de [14].

Revenons une dernière fois sur l'exemple de l'émission spontanée d'un atome. Suite à l'interaction de l'atome et du champ rayonné, l'état de l'atome et l'état du champ sont corrélés, de sorte que mesurer le champ consiste à s'informer sur l'atome. Dès lors, la mesure du champ est effectivement une mesure de l'atome. Cependant, comme nous l'avons déjà mentionné, la mesure directe de l'atome n'est pas projective. Ainsi, il y a lieu d'introduire un nouveau type de mesure, plus général, appelé *mesure non-projective* [14].

Soit un système  $S$  en contact avec un appareil de mesure identifié à l'environnement  $E$ . Supposons que l'appareil de mesure et le système soient dans deux états purs, notés respectivement  $|\theta(t)\rangle$  et  $|\phi(t)\rangle$ , initialement non-intriqués. L'état initial du système total  $S + E$ , noté  $|\psi(t)\rangle$ , s'écrit alors

$$|\psi(t)\rangle = |\theta(t)\rangle \otimes |\phi(t)\rangle. \quad (3.233)$$

Le système  $S + E$  constitue un système isolé. Ainsi, son évolution est gouvernée par un opérateur d'évolution unitaire. Nous notons  $U(\tau_1)$  l'opérateur d'évolution qui couple le système et l'environnement pendant le temps  $\tau_1$ . Après couplage, l'état du système  $S + E$  est simplement donné par<sup>46</sup>

$$|\psi(t + \tau_1)\rangle = U(\tau_1)(|\theta(t)\rangle \otimes |\phi(t)\rangle). \quad (3.234)$$

Appliquons le postulat de projection sur l'appareil de mesure en supposant que le temps de mesure  $\tau_2$  est bien inférieur au temps de couplage  $\tau_1$ , de sorte que l'évolution de système  $S + E$  pendant  $\tau_2$  est négligeable. Pour simplifier la discussion, les opérateurs de projection sont supposés être de rang unité, *i.e.*

$$\Pi_\mu = |\mu\rangle \langle \mu| \otimes I_S, \quad (3.235)$$

où  $\Pi_\mu$  est un opérateur de projection agissant sur le système  $S + E$ ,  $\{\mu\}$  est l'ensemble des résultats de mesure pour une certaine quantité physique  $\mathcal{B}$ ,  $\{|\mu\rangle\}$  est une base orthonormée de l'espace de Hilbert de l'appareil de mesure  $\mathcal{H}_E$ , et  $I_S$  est l'opérateur identité agissant sur l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}_S$  du système  $S$ . Sous ces hypothèses, l'état du système  $S + E$  conditionné par le résultat  $\mu$  est

$$\begin{aligned} |\psi_\mu(t + \tau_1 + \tau_2)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{P_\mu}} (|\mu\rangle \langle \mu| \otimes I_S) U(\tau_1) (|\theta(t)\rangle \otimes |\phi(t)\rangle) \\ &= \frac{|\mu\rangle}{\sqrt{P_\mu}} (\langle \mu| \otimes I_S) U(\tau_1) (|\theta(t)\rangle \otimes I_S) |\phi(t)\rangle \\ &= \frac{|\mu\rangle}{\sqrt{P_\mu}} \otimes M_\mu |\phi(t)\rangle \end{aligned} \quad (3.236)$$

en vertu de l'équation (3.231). L'opérateur  $M_\mu$  défini par

$$M_\mu = \langle \mu| U(\tau_1) |\theta(t)\rangle \quad (3.237)$$

n'agit que sur l'espace de Hilbert du système  $\mathcal{H}_S$ <sup>47</sup> et porte le nom d'*opérateur de mesure*. En rendant implicite le produit tensoriel de (3.236) et en posant  $\tau = \tau_1 + \tau_2$ , l'état du système  $S + E$  après mesure projective de l'appareil de mesure s'écrit

$$|\psi_\mu(t + \tau)\rangle = |\mu\rangle \frac{M_\mu |\phi(t)\rangle}{\sqrt{P_\mu}}. \quad (3.238)$$

La probabilité  $P_\mu$  associée au résultat de mesure  $\mu$  s'évalue directement par l'équation (3.229)

$$\begin{aligned} P_\mu &= \langle \psi(t + \tau_1) | (|\mu\rangle \langle \mu| \otimes I_S) | \psi(t + \tau_1) \rangle \\ &= \langle \phi(t) | \otimes \langle \theta(t) | U^\dagger(\tau_1) (|\mu\rangle \langle \mu| \otimes I_S) U(\tau_1) (|\theta(t)\rangle \otimes |\phi(t)\rangle) \\ &= \langle \phi(t) | \langle \theta(t) | U^\dagger(\tau_1) |\mu\rangle \langle \mu| U(\tau_1) |\theta(t)\rangle | \phi(t) \rangle \\ &= \langle \phi(t) | M_\mu^\dagger M_\mu | \phi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (3.239)$$

Commentons les résultats obtenus. L'équation (3.238) nous informe qu'à la fin de l'opération de mesure, l'état du système  $S + E$  est séparable et non pas intriqué. Ainsi, nous pouvons faire fi de

<sup>46</sup>Il est intéressant de remarquer que l'état  $|\psi(t + \tau_1)\rangle$  n'est pas, en règle générale, un état séparable.

<sup>47</sup>L'expression (3.237) est à comparer avec l'expression mathématiquement similaire (1.11) de l'opérateur densité réduit.

l'état de l'appareil de mesure et décrire l'opération de mesure uniquement en termes de l'opérateur de mesure  $M_\mu$ . L'état du système  $S$  conditionné par le résultat de mesure  $\mu$  s'écrit

$$|\phi_\mu(t + \tau)\rangle = \frac{M_\mu |\phi(t)\rangle}{\sqrt{P_\mu}}. \quad (3.240)$$

Par ailleurs, la probabilité d'obtenir le résultat  $\mathcal{B} = \mu$  dépend uniquement de l'opérateur de probabilité

$$E_\mu = M_\mu^\dagger M_\mu \quad (3.241)$$

au travers de l'équation (3.239). Les opérateurs de probabilité  $E_\mu$  doivent être définis positifs pour préserver la positivité des probabilités

$$\langle \phi | E_\mu | \phi \rangle = P_\mu \geq 0 \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}_S. \quad (3.242)$$

Il est également essentiel d'imposer la conservation de la probabilité

$$\sum_\mu P_\mu = \sum_\mu \langle \phi | E_\mu | \phi \rangle = 1 \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}_S, \quad (3.243)$$

ce qui revient à exiger

$$\sum_\mu E_\mu = I_S \quad (3.244)$$

car l'équation (3.243) est valable pour tout  $|\phi\rangle$  appartenant à  $\mathcal{H}_S$ . Les équations (3.242) et (3.244) sont les deux seules conditions que les opérateurs de probabilités doivent satisfaire afin de pouvoir être associés à des probabilités positives dont la somme vaut l'unité. Cette constatation mène à la notion de *POVM* [11] (*Positive Operator-Valued Measure*<sup>48</sup> en anglais).

**Définition 12** *Un ensemble d'opérateurs  $\{E_\mu\}$  est appelé mesure d'opérateurs positifs ou mesure d'opérateurs de probabilité (POVM) si*

1.  $E_\mu$  est défini positif pour tout  $\mu$ .
2. L'ensemble  $\{E_\mu\}$  est une résolution de l'identité, i.e.

$$\sum_\mu E_\mu = I \quad (3.245)$$

avec  $I$  l'opérateur identité agissant sur l'espace de Hilbert du système étudié.

La discussion que nous venons de tenir peut se généraliser au cas d'un état initial pour le système  $S + E$  de la forme

$$\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_E(t), \quad (3.246)$$

qui permet au système et à l'environnement d'être initialement dans des mélanges statistiques d'états. L'état du système après couplage avec l'appareil de mesure  $\rho_S(t + \tau)$  peut s'obtenir par un raisonnement parfaitement analogue à celui tenu dans le cas d'états initiaux sous forme vectorielle [14]. Cependant, le même résultat se dérive de façon plus élégante et directe par application de l'outil puissant des applications dynamiques quantiques introduit dans la section 3.2.1. L'évolution de l'état physique  $\rho_S$  ne peut se faire qu'au travers d'une telle application *via* la relation (3.16), réécrite ci-dessous<sup>49</sup>

$$\rho_S(t + \tau) = V(\tau)\rho_S(t) = \sum_j W_j(\tau)\rho_S(t), W_j^\dagger(\tau) \quad (3.247)$$

où les opérateurs  $\{W_j(\tau)\}$  vérifient

$$\sum_j W_j(\tau)^\dagger W_j(\tau) = I_S. \quad (3.248)$$

Vu la définition 12 et la relation (3.241), il est clair que nous avons l'identification

$$W_\mu = M_\mu \quad \forall \mu, \quad (3.249)$$

<sup>48</sup>Certains auteurs préfèrent la dénomination *probability operator-valued measure* [14].

<sup>49</sup>Nous utilisons les mêmes notations que celles employées dans la section 3.2.1. En particulier,  $V(\tau)$  est l'application dynamique quantique en question.

ce qui implique que l'état du système  $S$  après couplage est

$$\rho_S(t + \tau) = \sum_{\mu} M_{\mu}(\tau) \rho_S(t) M_{\mu}^{\dagger}(\tau). \quad (3.250)$$

L'état  $\rho_S(t + \tau)$  donné par (3.250) a été dérivé sans tenir compte du résultat de mesure obtenu après couplage, il s'agit donc de l'état non-conditionné par la mesure tel que défini par la relation (3.232). Nous avons donc l'égalité

$$\rho_S(t + \tau) = \sum_{\mu} M_{\mu}(\tau) \rho_S(t) M_{\mu}^{\dagger}(\tau) = \sum_{\mu} P_{\mu} \rho_{S,\mu}(t + \tau). \quad (3.251)$$

Par conséquent, l'état du système  $S$  conditionné par le résultat de mesure  $\mu$ , noté  $\rho_{S,\mu}(t + \tau)$ , est identifié à

$$\rho_{S,\mu}(t + \tau) = \frac{M_{\mu}(\tau) \rho_S(t) M_{\mu}^{\dagger}(\tau)}{P_{\mu}} \quad (3.252)$$

avec  $P_{\mu}$  donné par

$$P_{\mu} = \text{Tr}(M_{\mu}(\tau) \rho_S(t) M_{\mu}^{\dagger}(\tau)) = \text{Tr}(E_{\mu}(\tau) \rho_S(t)) \quad (3.253)$$

afin de garantir  $\text{Tr}(\rho_{S,\mu}) = 1$ .

Nous terminons cette section par une remarque sur la différence entre les mesures projectives et non-projectives. Les mesures non-projectives ne s'expriment pas en termes d'observables. En effet, cette notion n'a pas été utilisée dans la discussion tenue ci-dessus et l'ensemble  $\{\mu\}$  n'est pas nécessairement le spectre d'un opérateur hermitien. De même, les éléments d'un POVM ne sont pas forcément des projecteurs. Par exemple, soit un espace de Hilbert à deux dimensions  $\mathcal{H}$  sous-tendu par la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ . Supposons que la mesure est continue et que  $\{\mu\} = [0, 2\pi[$ . Définissons les opérateurs de mesure par

$$M_{\mu} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} |\mu\rangle \langle \mu|, \quad (3.254)$$

où

$$|\mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + \exp(i\mu) |-\rangle). \quad (3.255)$$

Les opérateurs de probabilité associés s'écrivent alors

$$\begin{aligned} E_{\mu} &= M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} \\ &= \frac{1}{\pi} |\mu\rangle \langle \mu|. \end{aligned} \quad (3.256)$$

L'ensemble  $\{E_{\mu}\}$  est un POVM car les opérateurs  $E_{\mu}$  sont visiblement définis positifs pour tout  $\mu$  dans  $[0, 2\pi[$  et  $\{E_{\mu}\}$  est une résolution de l'identité

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\mu E_{\mu} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\mu (|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| + \exp(-i\mu) |+\rangle \langle -| + \exp(i\mu) |-\rangle \langle +|) \\ &= |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| = I. \end{aligned} \quad (3.257)$$

Le carré des opérateurs de probabilité est donné par

$$E_{\mu} E_{\mu} = \frac{1}{\pi} E_{\mu} \neq E_{\mu}, \quad (3.258)$$

ce qui implique que  $E_{\mu}$  n'est pas un projecteur. En outre, les opérateurs de probabilité ne sont pas orthogonaux en règle générale, sauf si  $\mu' = \mu + \pi$ . Ce résultat se vérifie aisément à l'aide des équations (3.256) et (3.255). Dès lors, même si l'état initial du système est  $|\mu\rangle$ , le résultat  $\mu$  n'est pas garanti car la probabilité d'obtenir  $\mu' \neq \mu + \pi$  est non-nulle. En particulier, répéter une opération de mesure n'assure pas d'obtenir le même résultat de mesure.

### 3.4.7 Méthode des sauts quantiques - QJA

#### Introduction

Nous présentons le second unravelling de ce mémoire appelée *méthode des sauts quantiques* ou *QJA* (*Quantum Jump Approach* en anglais). Cette méthode a été introduite par Claude Cohen-Tannoudji et Dalibard en 1986 [17] puis enrichie de la contribution de Zoller, Marte et Walls en 1987 [5] dans le contexte de l'émission de fluorescence d'un atome à trois niveaux. Les équations que nous dérivons ci-dessous n'ont pas la même forme que celles obtenues dans les articles originaux car la méthode QJA est exprimée ici en termes d'équations différentielles stochastiques. La preuve s'inspire de [14].

### Démonstration

La théorie des mesures non-projectives de la section 3.5.6 fait usage de la notion d'applications dynamiques quantiques. Or, cette même notion a permis de dériver l'équation de Lindblad dans la section 3.2. Dès lors, il vient naturellement l'interrogation suivante: "Peut-on reconstruire l'équation de Lindblad à l'aide de la théorie des mesures non-projectives ?". La réponse est affirmative. Ainsi, pour la troisième fois dans ce mémoire, nous dérivons l'équation de Lindblad. Pour ce faire, nous partons de l'état non-conditionné par la mesure donné par (cf. équation (3.251))

$$\rho_S(t + \tau) = \sum_{\mu} M_{\mu}(\tau) \rho_S(t) M_{\mu}^{\dagger}(\tau). \quad (3.259)$$

Afin d'obtenir une équation différentielle pour  $\rho_S$ , il nous faut considérer un temps de mesure  $\tau = dt$  infinitésimal<sup>50</sup>. Nous avons donc

$$\rho_S(t + dt) = \sum_{\mu} M_{\mu}(dt) \rho_S(t) M_{\mu}^{\dagger}(dt). \quad (3.260)$$

Nous définissons ensuite deux opérateurs de mesure

$$M_0(dt) = I - \left( \frac{R}{2} + \frac{i}{\hbar} H \right) dt, \quad M_1(dt) = \sqrt{dt} L \quad (3.261)$$

avec  $R$  et  $H$  deux opérateurs hermitiens,  $I$  l'opérateur identité et  $L$  un opérateur satisfaisant  $L^{\dagger}L = R$ . Les opérateurs  $M_0$  et  $M_1$  sont associés aux deux résultats de mesure  $\mu = 0$  et  $\mu = 1$ <sup>51</sup>. Pour que les opérateurs de mesure  $M_0$  et  $M_1$  soient bien définis, il faut que l'ensemble  $\{E_{\mu} = M_{\mu}^{\dagger}M_{\mu}\} = \{M_0^{\dagger}M_0, M_1^{\dagger}M_1\}$  définisse un POVM<sup>52</sup>. La relation de fermeture (3.245) est bien vérifiée

$$\begin{aligned} M_0^{\dagger}(dt)M_0(dt) + M_1^{\dagger}(dt)M_1(dt) &= \left( I - \left( \frac{R}{2} - \frac{i}{\hbar} H \right) dt \right) \left( I - \left( \frac{R}{2} + \frac{i}{\hbar} H \right) dt \right) + dt L^{\dagger}L \\ &= I - \left( \frac{R}{2} - \frac{i}{\hbar} H \right) dt - \left( \frac{R}{2} + \frac{i}{\hbar} H \right) dt + dt L^{\dagger}L \\ &= I, \end{aligned} \quad (3.262)$$

où nous n'avons pas gardé les différentielles d'ordre supérieur à un car nous sommes dans le cadre de l'analyse traditionnelle et non stochastique (deuxième ligne) et nous avons utilisé la relation  $R = L^{\dagger}L$  (dernière ligne). Il nous reste à vérifier que la positivité des opérateurs  $E_{\mu}$ . Comme  $E_1(dt) = M_1^{\dagger}(dt)M_1(dt) = dt L^{\dagger}L = dt R$ ,  $E_1$  est défini positif si  $R$  est défini positif. Quant à  $E_0(dt)$ , nous avons

$$E_0(dt) = M_0^{\dagger}(dt)M_0(dt) = I - Rdt, \quad (3.263)$$

qui est un opérateur positif dans la limite  $dt \rightarrow 0$ <sup>53</sup> car  $I$  est défini positif.

Il est à présent immédiat de vérifier que les opérateurs de mesures  $M_0$  et  $M_1$  permettent de reconstruire l'équation de Lindblad à un seul lindbladien. En vertu de (3.260), l'évolution de  $\rho_S$  est gouvernée par l'équation

$$\begin{aligned} \rho_S(t + dt) &= M_0(dt) \rho_S(t) M_0^{\dagger}(dt) + M_1(dt) \rho_S(t) M_1^{\dagger}(dt) \\ &= \left( I - \left( \frac{L^{\dagger}L}{2} + \frac{i}{\hbar} H \right) dt \right) \rho_S(t) \left( I - \left( \frac{L^{\dagger}L}{2} - \frac{i}{\hbar} H \right) dt \right) + L \rho_S(t) L^{\dagger} dt \\ &= \rho_S(t) - \rho_S(t) \left( \frac{L^{\dagger}L}{2} - \frac{i}{\hbar} H \right) dt - \left( \frac{L^{\dagger}L}{2} + \frac{i}{\hbar} H \right) \rho_S(t) dt + L \rho_S(t) L^{\dagger} dt \\ &= \rho_S(t) - \frac{i}{\hbar} [H, \rho_S(t)] dt + dt \left( L \rho_S(t) L^{\dagger} - \frac{1}{2} \rho_S(t) L^{\dagger}L - \frac{1}{2} L^{\dagger}L \rho_S(t) \right), \end{aligned} \quad (3.264)$$

qui est équivalente à

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho_S(t)] + L \rho_S(t) L^{\dagger} - \frac{1}{2} \rho_S(t) L^{\dagger}L - \frac{1}{2} L^{\dagger}L \rho_S(t). \quad (3.265)$$

<sup>50</sup>On dit alors que le système est *contrôlé* ou *surveillé* (*monitoring systems* en anglais) [14].

<sup>51</sup>Les valeurs 0 et 1 sont arbitraires et permettent simplement de distinguer les deux opérateurs de mesure (3.261).

<sup>52</sup>C'est d'ailleurs de cette façon que l'expression des opérateurs  $M_0$  et  $M_1$  a été déterminée.

<sup>53</sup>Rappelons que  $dt$  ne peut pas, strictement parlant, tendre vers 0 car l'approximation de Born-Markov implique nécessairement l'inégalité  $\Delta t \gg \tau_E$  (voir équation (3.129)). Cette difficulté est cependant rapidement contournée en imposant la positivité de l'opérateur  $I - Rdt$  pour des temps  $\Delta t$  vérifiant la relation  $\tau_E \ll \Delta t \ll \tau_R$ .

Cette dernière équation est l'équation de Lindblad (3.49) dans le cas particulier d'un unique lindbladien  $L$ .

Dérivons l'équation différentielle stochastique qui constitue l'unravelling QJA à l'aide des opérateurs de mesure  $M_0$  et  $M_1$  défini par (3.261). La probabilité d'obtenir le résultat  $\mu = 1$  s'écrit

$$P_1(dt) = \text{Tr}(E_1(dt)\rho_S(t)) = dt \text{Tr}(L^\dagger L \rho_S), \quad (3.266)$$

vu la relation (3.253). Dès lors,  $P_1$  est infinitésimal si  $L^\dagger L$  est borné<sup>54</sup>. Autrement dit, pour presque tous les intervalles du type  $[t, t + dt]$ , le résultat de mesure est  $\mu = 0$  car la probabilité d'occurrence de ce résultat est  $P_0(dt) = 1 - P_1(dt) \approx 1$ . Pour tous ces intervalles de temps infinitésimaux, l'état du système évolue de façon *infinitésimale via* l'opérateur  $M_0(dt)$  au travers de la relation (3.252). A certains instants *aléatoires*, il y a *détection*, *i.e.* que le résultat  $\mu = 1$  est observé et l'état du système subit un changement *fini* et déterminé par l'opérateur  $M_1(dt)$  et l'équation (3.252). Le taux d'occurrence des résultats  $\mu = 1$  est simplement donné par  $P_1(dt)/dt$  et le terme *saut quantique* est employé pour désigner le changement fini de l'état du système associé au résultat  $\mu = 1$ .

Supposons que l'état initial du système  $S$  est donné par l'état pur  $|\psi(t)\rangle$ . Nous notons  $N(t)$  le nombre total de détections enregistrées depuis l'instant initial jusqu'au temps  $t$ . Dans ce cadre, la différentielle stochastique appropriée est un cas particulier de la définition 6 des différentielles ponctuelles.

**Définition 13** Une différentielle  $dN$  est dite de saut si

1.  $(dN(t))^2 \equiv dN(t)^2 = dN(t)$ .
2.  $\mathbb{E}(dN(t)) = \langle M_1^\dagger(dt)M_1(dt) \rangle = dt \langle \psi(t) | L^\dagger L | \psi(t) \rangle$ .

La première condition signifie que  $dN(t)$  vaut soit 0 soit 1. Cette hypothèse est naturelle car sur un intervalle de temps  $[t, t + dt]$ , il y a soit une détection (auquel cas l'incrément  $dN(t)$  vaut 1), soit aucune détection (auquel cas l'incrément  $dN(t)$  vaut 0). La deuxième condition impose que la moyenne des incréments  $\mathbb{E}(dN)$  soit égale à la probabilité  $P_1$  d'observer une détection multiplié par  $dt$ .

Pour obtenir l'équation différentielle stochastique QJA, il nous reste à déterminer l'évolution  $|d\psi\rangle = |\psi(t + dt)\rangle - |\psi(t)\rangle$  induite par les opérateurs  $M_0(dt)$  et  $M_1(dt)$ . Lorsqu'il y a détection, *i.e.* lorsque  $dN(t) = 1$ , l'état conditionné par le résultat de mesure  $\mu = 1$  est

$$\begin{aligned} |\psi_1(t + dt)\rangle &= \frac{M_1(dt) |\psi(t)\rangle}{\sqrt{\langle M_1^\dagger(dt)M_1(dt) \rangle}} \\ &= \frac{L |\psi(t)\rangle}{\sqrt{\langle L^\dagger L \rangle}}, \end{aligned} \quad (3.267)$$

vu le résultat (3.240). De même, dans le cas où il n'y pas de détection, *i.e.* dans le cas  $dN(t) = 0$ , nous avons successivement

$$\begin{aligned} |\psi_0(t + dt)\rangle &= \frac{M_0(dt) |\psi(t)\rangle}{\sqrt{\langle M_0^\dagger(dt)M_0(dt) \rangle}} \\ &= \left( I - dt \left( \frac{L^\dagger L}{2} + \frac{i}{\hbar} H \right) \right) \langle I - L^\dagger L dt \rangle^{-\frac{1}{2}} |\psi(t)\rangle \\ &= \left( I - dt \left( \frac{L^\dagger L}{2} + \frac{i}{\hbar} H \right) \right) \left( 1 + dt \frac{\langle L^\dagger L \rangle}{2} \right) |\psi(t)\rangle \\ &= \left( I - dt \left( \frac{i}{\hbar} H + \frac{L^\dagger L}{2} - \frac{\langle L^\dagger L \rangle}{2} \right) \right) |\psi(t)\rangle, \end{aligned} \quad (3.268)$$

en développant le dénominateur jusqu'à l'ordre un en  $dt$ . A la lumière des deux relations (3.267) et (3.268), il est immédiat de déduire que l'expression de l'équation différentielle stochastique de la méthode des sauts quantiques, ou *équation QJA*, est donnée par

$$|d\psi(t)\rangle = \left[ dN(t) \left( \frac{L}{\sqrt{\langle L^\dagger L \rangle}} - I \right) + (1 - dN(t)) dt \left( \frac{\langle L^\dagger L \rangle}{2} - \frac{i}{\hbar} H - \frac{L^\dagger L}{2} \right) \right] |\psi(t)\rangle \quad (3.269)$$

dans le cas d'un unique lindbladien  $L$ . Notons d'ores et déjà que cette équation est, à l'instar de l'équation QSD, *non-linéaire* car le terme  $\langle L^\dagger L \rangle$  dépend quadratiquement de  $|\psi(t)\rangle$ .

<sup>54</sup>Cette hypothèse a déjà été discutée à la fin de la section 3.2.3.

Insistons encore sur la différence fondamentale entre les deux cas  $dN(t) = 0$  et  $dN(t) = 1$ . Dans le premier cas, l'équation QJA (3.269) se réduit à

$$|d\psi(t)\rangle = dt \left( \frac{\langle L^\dagger L \rangle}{2} - \frac{i}{\hbar} H - \frac{L^\dagger L}{2} \right). \quad (3.270)$$

Ainsi, l'évolution de  $|\psi(t)\rangle$  sur un temps infinitésimal  $dt$  est *infinitésimale*. En revanche, lorsque  $dN(t) = 1$ , l'équation QJA (3.269) est

$$|d\psi(t)\rangle = \left( \frac{L}{\sqrt{\langle L^\dagger L \rangle}} - I \right), \quad (3.271)$$

ce qui implique que l'évolution de  $|\psi(t)\rangle$  sur un temps  $dt$  est *finie*. Autrement dit, dans le cas d'une détection, l'évolution de  $|\psi(t)\rangle$  est *discontinue* car

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} |\psi(t + \Delta t) - \psi(t)| = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} |\Delta\psi(t)| \neq 0. \quad (3.272)$$

L'appellation *saut quantique* est donc parfaitement naturelle.

L'équation QJA (3.269) admet une forme simplifiée. En effet, nous savons que nous pouvons négliger le terme proportionnel à  $dN(t)dt$ <sup>55</sup>. Par conséquent, l'équation QJA admet la forme simplifiée

$$|d\psi(t)\rangle = \left[ dN(t) \left( \frac{L}{\sqrt{\langle L^\dagger L \rangle}} - I \right) + dt \left( \frac{\langle L^\dagger L \rangle}{2} - \frac{i}{\hbar} H - \frac{L^\dagger L}{2} \right) \right] |\psi(t)\rangle. \quad (3.273)$$

Pour généraliser l'équation QJA (3.273) au cas d'un nombre arbitraire de lindbladiens, l'idée est d'exploiter la règle d'additivité introduite dans la preuve de l'équation QSD. A chaque lindbladien  $L_j$ , nous associons une différentielle stochastique de saut  $dN_j(t)$  et nous imposons l'indépendance de ces différentielles à l'aide d'un symbole de Krönecker<sup>56</sup>. Un tel ensemble de différentielles stochastiques constitue un *ensemble de saut standard*<sup>57</sup>.

**Définition 14** Un ensemble  $\{dN_j(t)\}$  de différentielles stochastiques forme un ensemble de saut standard si

1.  $dN_j(t)dN_{j'}(t) = \delta_{jj'}dN_j(t)$ .
2.  $\mathbb{E}(dN_j(t)) = dt \langle \psi(t) | L_j^\dagger L_j | \psi(t) \rangle$ .

En vertu de la règle d'additivité, l'équation QJA pour un nombre arbitraire de Lindbladien s'écrit alors

$$|d\psi(t)\rangle = \sum_j \left[ dN_j(t) \left( \frac{L_j}{\sqrt{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}} - I \right) + dt \left( \frac{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}{2} - \frac{i}{\hbar} H - \frac{L_j^\dagger L_j}{2} \right) \right] |\psi(t)\rangle, \quad (3.274)$$

avec  $\{dN_j(t)\}$  un ensemble de différentielles stochastiques de saut standard.

Par construction, l'équation QJA générale (3.274) préserve la norme et constitue un unravelling de l'équation de Lindblad (3.49). En effet, les opérateurs  $M_0$  et  $M_1$ , donnés par (3.261), préservent la norme et permettent de reconstruire l'équation de Lindblad. Comme dans le cas de l'équation QSD, il est toutefois instructif de montrer explicitement que l'équation QJA est un unravelling de l'équation de Lindblad<sup>58</sup>. Pour ce faire, il est commode d'introduire l'opérateur

$$\rho_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|, \quad (3.275)$$

avec  $|\psi\rangle$  solution de l'équation QJA. Nous avons alors

$$\begin{aligned} d\rho_\psi &= d(|\psi\rangle \langle \psi|) = |d\psi\rangle \langle \psi| + |\psi\rangle \langle d\psi| + |d\psi\rangle \langle d\psi| \\ &= \sum_j \left[ dN_j \left( \frac{L_j}{\sqrt{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}} - I \right) + dt \left( \frac{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}{2} - \frac{i}{\hbar} H - \frac{L_j^\dagger L_j}{2} \right) \right] \rho_\psi \\ &\quad + \rho_\psi \sum_j \left[ dN_j \left( \frac{L_j^\dagger}{\sqrt{\langle L_j L_j^\dagger \rangle}} - I \right) + dt \left( \frac{\langle L_j L_j^\dagger \rangle}{2} + \frac{i}{\hbar} H - \frac{L_j L_j^\dagger}{2} \right) \right] \\ &\quad + \sum_j \sum_{j'} \left( \frac{L_j}{\sqrt{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}} - I \right) \rho_\psi \left( \frac{L_{j'}^\dagger}{\sqrt{\langle L_{j'} L_{j'}^\dagger \rangle}} - I \right) dN_j dN_{j'}. \end{aligned} \quad (3.276)$$

<sup>55</sup>Voir chapitre 2.

<sup>56</sup>Cela revient à considérer que ces différentielles sont orthogonales, ce qui peut toujours être supposé (il suffit en effet d'adapter l'équation (3.179)).

<sup>57</sup>Cette appellation est propre à ce mémoire.

<sup>58</sup>Pour montrer que l'équation QJA préserve la norme, le raisonnement est parfaitement analogue.

En prenant la moyenne statistique de la dernière équation et en utilisant la définition axiomatique 14, il vient

$$\begin{aligned}
d\rho &= \left[ \mathbb{E}(dN_j) \left( \frac{L_j}{\sqrt{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}} - I \right) + dt \left( \frac{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}{2} - \frac{i}{\hbar} H - \frac{L_j^\dagger L_j}{2} \right) \right] \rho \\
&+ \rho \sum_j \left[ \mathbb{E}(dN_j) \left( \frac{L_j^\dagger}{\sqrt{\langle L_j L_j^\dagger \rangle}} - I \right) + dt \left( \frac{\langle L_j L_j^\dagger \rangle}{2} + \frac{i}{\hbar} H - \frac{L_j L_j^\dagger}{2} \right) \right] \\
&+ \sum_j \sum_{j'} \left( \frac{L_j}{\sqrt{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}} - I \right) \rho \left( \frac{L_{j'}^\dagger}{\sqrt{\langle L_{j'} L_{j'}^\dagger \rangle}} - I \right) \mathbb{E}(dN_j dN_{j'}) \\
&= \left[ dt \langle L_j^\dagger L_j \rangle \left( \frac{L_j}{\sqrt{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}} - I \right) + dt \left( \frac{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}{2} - \frac{i}{\hbar} H - \frac{L_j^\dagger L_j}{2} \right) \right] \rho \quad , \quad (3.277) \\
&+ \rho \sum_j \left[ dt \langle L_j^\dagger L_j \rangle \left( \frac{L_j^\dagger}{\sqrt{\langle L_j L_j^\dagger \rangle}} - I \right) + dt \left( \frac{\langle L_j L_j^\dagger \rangle}{2} + \frac{i}{\hbar} H - \frac{L_j L_j^\dagger}{2} \right) \right] \\
&+ \sum_j \left( \frac{L_j}{\sqrt{\langle L_j^\dagger L_j \rangle}} - I \right) \rho \left( \frac{L_j^\dagger}{\sqrt{\langle L_j L_j^\dagger \rangle}} - I \right) dt \langle L_j^\dagger L_j \rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] dt + dt \sum_j L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2} \rho L^\dagger L - \frac{1}{2} L^\dagger L \rho
\end{aligned}$$

où  $\rho \equiv \mathbb{E}(\rho_\psi)$ . La moyenne statistique sur les projecteurs  $\rho_\psi$  évolue bien selon l'équation de Lindblad (3.49). Autrement dit, l'équation QJA (3.274) constitue un unravelling de l'équation de Lindblad.

### Commentaires

Résumons les divers résultats obtenus dans la dérivation de l'équation QJA (3.274). Cette équation est une équation différentielle stochastique *non-linéaire* et *non-locale*<sup>59</sup> en raison des termes  $\langle L^\dagger L \rangle \equiv \langle \psi | L^\dagger L | \psi \rangle$ . Ajoutons que l'équation QJA préserve la norme des solutions. Ces propriétés sont partagées par l'équation QSD.

La différence majeure entre l'unravelling QJA et l'unravelling QSD est la *non-continuité* des solutions de l'équation QJA. Cette non-continuité a été interprétée en termes de *sauts quantiques* associés à un évènement de *détection*. La discontinuité des trajectoires QJA est illustrée par les simulations de la section suivante.

### 3.4.8 Simulations

Cette section présente les simulations de l'équation QJA (3.274) sur les exemples choisis pour illustrer les propriétés de l'équation QSD. Nous utilisons les mêmes notations et conventions que celles utilisées dans la section 3.5.5.

#### Exemple: émission spontanée

Nous commençons par considérer le phénomène d'émission spontanée. L'unique lindbladien est donné par

$$L = \sqrt{\gamma_e} \sigma_m, \quad (3.278)$$

et la condition initiale est

$$|\psi\rangle = |e\rangle. \quad (3.279)$$

Sans surprise, les trajectoires sont discontinues et caractérisées par un saut aléatoire, associé à l'émission d'un photon. La figure 3.13 représente la valeur moyenne  $\langle \sigma_z \rangle$  pour cinq trajectoires typiques. Il est important de remarquer la similitude des trajectoires QJA et des trajectoires QSD limites représentées à la figure 3.9. En particulier, le temps nécessaire pour observer un saut est du même ordre de grandeur.

<sup>59</sup>Nous renvoyons le lecteur à la discussion tenue dans le cadre de l'équation QSD.

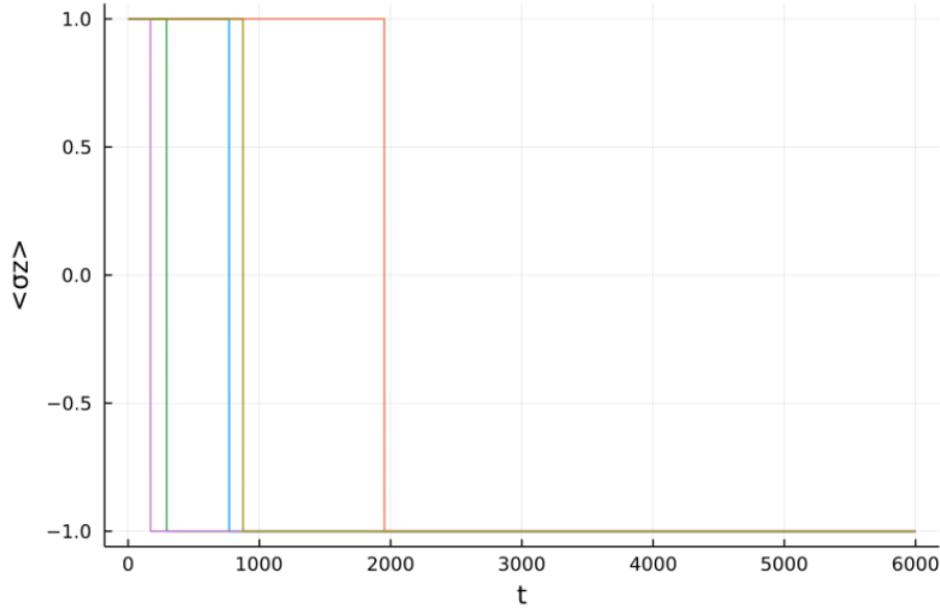


Figure 3.13: Valeur moyenne  $\langle \sigma_z \rangle$  en fonction du temps pour  $\gamma_e = 0.09$  et pour un atome initialement excité pour cinq trajectoires différentes tracées en différentes couleurs. L'intervalle de temps est  $[0, 60]$  avec un pas de temps de 0.01.

Comme l'équation QJA est un unravelling, la moyenne statistique sur *toutes* les trajectoires de  $P = \frac{1}{2}(1 + \langle \sigma_z \rangle)$ , déterminant la population de l'état excité, doit donner

$$P = \exp(-\gamma_e t). \quad (3.280)$$

La figure 3.14 compare les résultats obtenus en tronquant la moyenne statistique avec un nombre croissant de trajectoires et la solution analytique (3.280) issue de l'équation maîtresse. En comparant les figures 3.14 et 3.10, il apparaît que la méthode QSD converge plus rapidement que la méthode QJA dans le cas particulier de l'émission spontanée d'un atome à deux niveaux.

#### Exemple: mesure de la composante $z$ du spin d'un atome

Pour un atome de spin  $\frac{1}{2}$  soumis à une opération de mesure de son spin, il suffit de considérer le lindbladien

$$L = \sqrt{\gamma_m} \sigma_z. \quad (3.281)$$

L'état initial  $|\psi\rangle$  est choisi de sorte que les résultats de mesure  $\langle \sigma_z \rangle = +1$  et  $\langle \sigma_z \rangle = -1$  soient équiprobables

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle). \quad (3.282)$$

La figure 3.15 montre l'évolution temporelle de  $\langle \sigma_z \rangle$  pour une trajectoire obtenue par simulation de l'équation QJA (3.273) avec le lindbladien (3.281) et la condition initiale (3.282). Il s'avère que toutes les trajectoires donnent  $\langle \sigma_z \rangle(t) = 0$ . Or, expérimentalement, la mesure de  $\langle \sigma_z \rangle$  donne 50% du temps le résultat  $\langle \sigma_z \rangle = -1$  et 50% du temps le résultat  $\langle \sigma_z \rangle = +1$ .

Le désaccord provient du fait que la mesure de  $\langle \sigma_z \rangle$  est un processus intrinsèquement diffusif, comme l'illustre la figure 3.4 obtenue par simulation de l'équation QSD. Ainsi, à l'instar de la discussion tenue dans le cadre de l'émission spontanée d'un atome pour l'équation QSD, nous aimerions trouver des trajectoires QJA qui, dans une limite à déterminer, se rapprochent de celles obtenues par simulation de l'équation QSD. Autrement dit, nous allons montrer sur un exemple que l'équation QSD peut être vue comme un cas limite de l'équation QJA.

Rappelons que l'équation de Lindblad (3.49) est invariante par rapport à la transformation inhomogène (*cf.* équation (3.52))

$$\begin{aligned} L &\rightarrow L' = L + c \\ H &\rightarrow H' = H - \frac{1}{2}i(c^*L - cL^\dagger), \end{aligned} \quad (3.283)$$

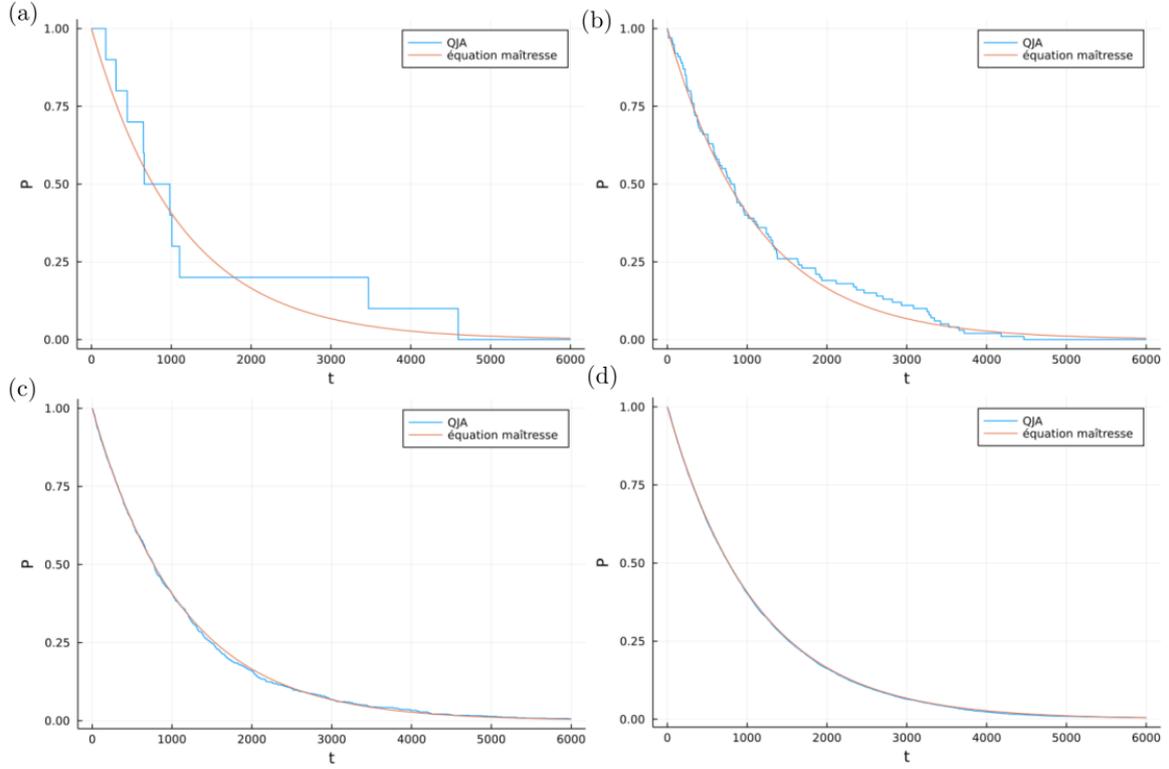


Figure 3.14: Comparaison de l'évolution temporelle de la population de l'état excité  $P = \langle +|\rho_S|+ \rangle = \frac{1}{2}(1 + \langle \sigma_z \rangle)$  calculée par moyenne statistique sur un nombre  $N$  de trajectoires et de l'expression analytique (3.280) provenant de l'équation maîtresse. Les graphiques (a), (b), (c) et (d) considèrent respectivement 10, 100, 1000 et 10000 trajectoires. Pour tous les graphiques, l'intervalle de temps est  $[0, 60]$  avec un pas de temps de 0.01 et  $\gamma_e = 0.09$ .

avec  $c$  un nombre complexe quelconque. Dans le contexte de la mesure du spin d'un atome, les opérateurs  $L'$  et  $H'$  s'écrivent

$$\begin{aligned} L' &= \sqrt{\gamma_m} \sigma_z + c \\ H' &= -\frac{1}{2} i \sqrt{\gamma_m} (c^* \sigma_z - c \sigma_z), \end{aligned} \quad (3.284)$$

vu la relation (3.281).

La figure 3.16 représente l'évolution temporelle de  $\langle \sigma_z \rangle$  obtenue par simulation de l'équation QJA avec  $L'$  et  $H'$  défini par (3.284). Plus  $|c|$  augmente, plus les trajectoires se rapprochent de celles obtenues par simulation de l'équation QSD (voir figure 3.6). Par conséquent, dans le cas d'une mesure du spin d'un atome de spin  $\frac{1}{2}$ , la limite  $|c| \rightarrow +\infty$  permet de retrouver les trajectoires issues de l'équation QSD.

### Exemple: superradiance

Nous clôturons l'étude des trajectoires QJA par le calcul de l'intensité rayonnée par une collection d'atomes en cavité dans le régime superradiant. Nous considérons dès lors le lindbladien

$$L = \sqrt{\gamma_s} \Sigma_-, \quad (3.285)$$

avec  $\gamma_s = 1$  et les  $N$  atomes initialement excités.

Dans ces conditions, la simulation de l'équation QJA fournit la figure 3.17 qui est fortement semblable à la figure 3.11. En particulier, la hauteur des pics superradiants et les instants auxquels ces pics surviennent sont pratiquement égaux.

Comme dans le cas de l'étude des trajectoires QSD, nous particulierisons la discussion au cas  $N = 4$  pour illustrer l'équivalence entre l'unravelling QJA et l'équation maîtresse de Lindblad. Les résultats sont représentés sur la figure 3.18. L'accord entre la solution analytique (3.222) et l'intensité obtenue par moyenne statistique à l'aide de l'équation QJA est très bon. Notons que, dans le cas particulier de la simulation de l'équation maîtresse superradiante (3.216), la convergence des trajectoires QJA est plus rapide que celles de l'équation QSD (voir figure 3.12).

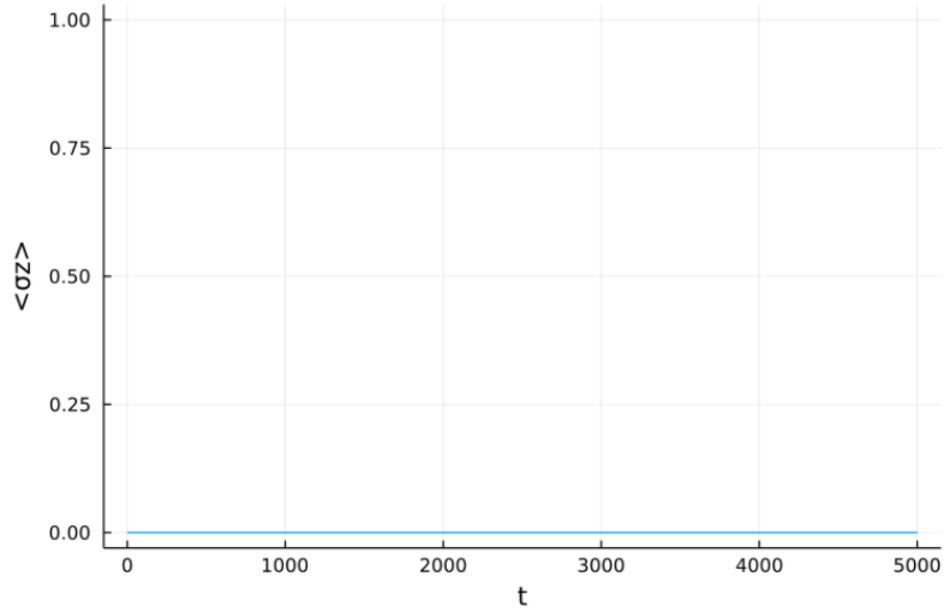


Figure 3.15: Evolution temporelle de  $\langle \sigma_z \rangle$ . La simulation s'effectue sur l'intervalle de temps  $[0, 25]$  avec un pas de temps de 0.005 et  $\gamma_m = 0.09$ . La condition initiale est définie par (3.282).

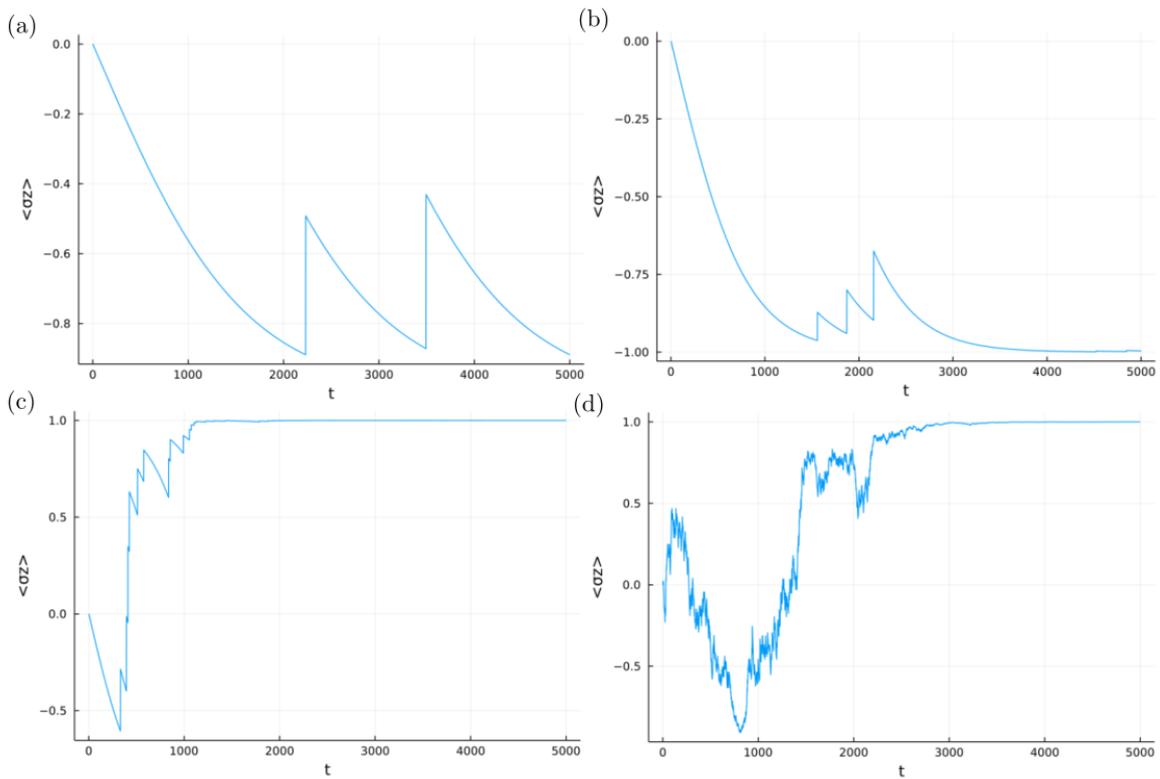


Figure 3.16: Valeur moyenne  $\langle \sigma_z \rangle$  en fonction du temps pour différentes valeurs de  $|c|$  et pour la condition initiale (3.282). Pour les graphiques (a), (b), (c) et (d),  $|c|$  vaut respectivement 0.3, 0.6, 1, 10. Pour tous les graphiques, l'intervalle de temps est  $[0, 25]$  avec un pas de temps de 0.005.

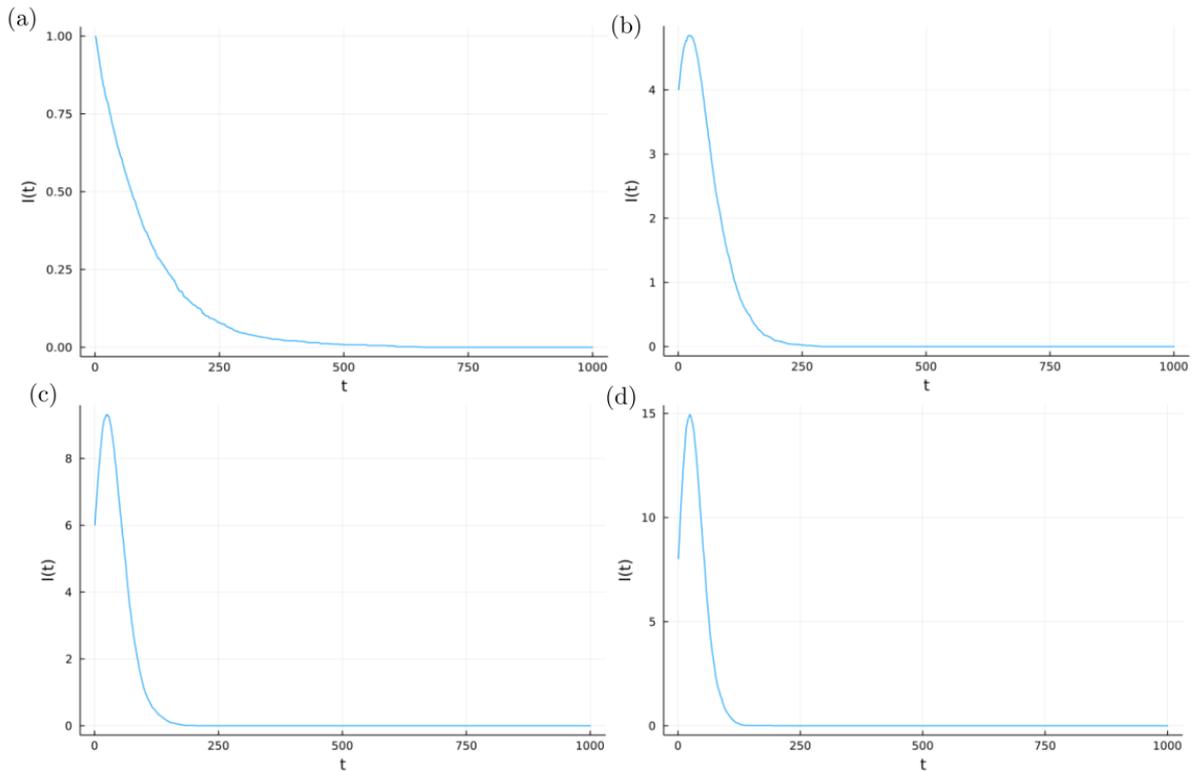


Figure 3.17: Évolution de l'intensité rayonnée par une distribution atomique de  $N$  atomes obtenue par simulation de l'équation QJA avec  $L$  donné par (3.217) et avec la condition initiale (3.221). Les graphiques (a), (b), (c) et (d) correspondent respectivement à un nombre d'atomes  $N$  égal à 1, 4, 6 et 8. Il est important de remarquer la différence d'échelle sur l'axe  $y$  représentant l'intensité  $I(t)$ . Pour tous les graphiques, l'intervalle de temps est  $[0, 10]$ , le pas de temps est 0.01 et la moyenne statistique est prise pour 1000 trajectoires.

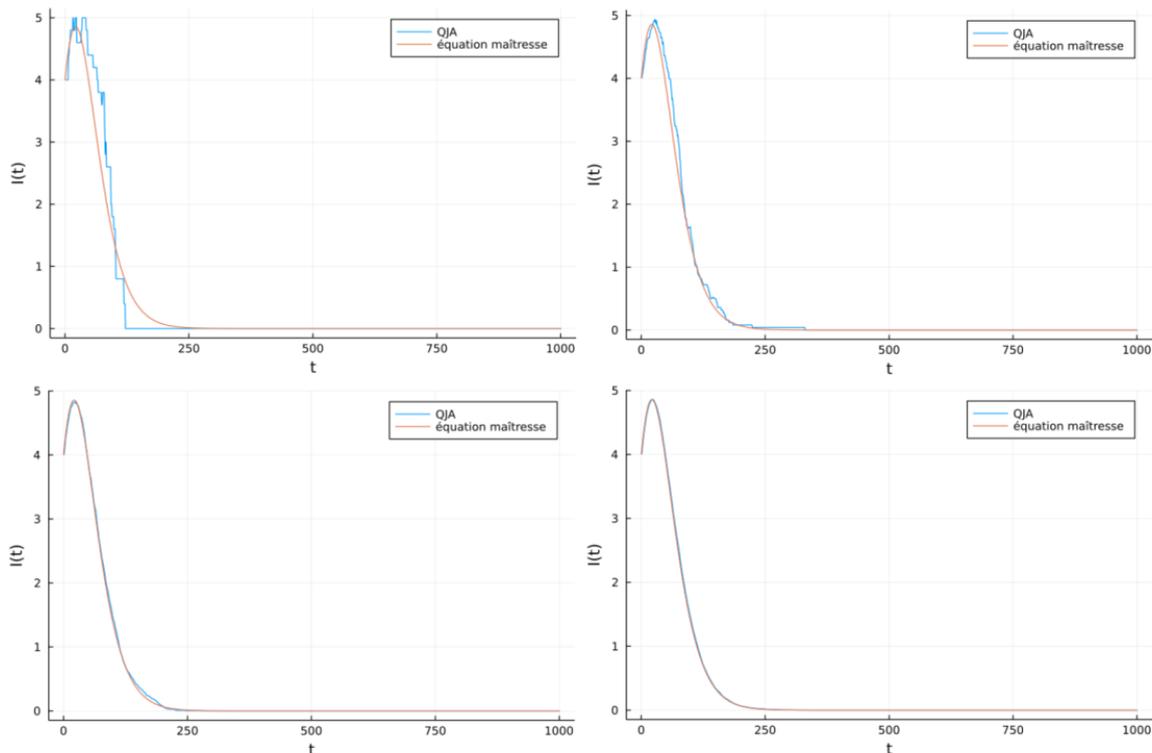


Figure 3.18: Comparaison de la solution analytique (3.222) avec l'intensité obtenue par simulation de l'équation QJA avec  $L$  donné par (3.217) et avec la condition initiale (3.221). Le nombre d'atomes est fixé à 4. Les graphiques (a), (b), (c), (d) correspondent respectivement à 10, 100, 1000, 10000 trajectoires. Pour tous les graphiques, l'intervalle de temps est  $[0, 10]$  et le pas de temps est 0.01.

### 3.4.9 Équivalence entre les démêlages QSD et QJA

Jusqu'à présent, nous avons démontré l'existence de deux unravellings ou démêlages de l'équation maîtresse de Lindblad (3.49): la méthode QSD et la méthode QJA. L'équivalence entre ces deux unravellings a été suggérée numériquement sur des exemples. Pour l'équation QSD, nous avons montré, dans le cas de l'émission spontanée, qu'il était possible de recouvrer les sauts quantiques caractéristiques de la méthode QJA. De même, pour l'équation QJA, nous avons montré que les trajectoires obtenues dans le cadre d'une mesure de spin s'approchaient d'une diffusion de type QSD dans une certaine limite. Existe-t-il un unravelling plus fondamental que l'autre<sup>60</sup> ?

Pour répondre à cette question, il est intéressant de développer une analogie avec la physique classique. En mécanique newtonienne, la rotation de la Terre autour du Soleil est décrite au moyen d'un transfert *continu* d'impulsion. Cependant, le mouvement d'un pendule de Newton ou d'une boule de billard frappée par un joueur est décrit par un transfert d'impulsion supposé *instantané*. Le mouvement de la boule de billard peut être vu comme un cas limite de transfert continu d'impulsion en constatant que le transfert instantané d'impulsion peut être vu comme un transfert continu sur un temps très court<sup>61</sup>. Inversement, un transfert continu d'impulsion peut résulter de la concaténation d'un grand nombre de petits pulses d'impulsion instantanés. Les deux approches sont parfaitement équivalentes. Cependant, en physique classique, le transfert d'impulsion continu est souvent considéré comme fondamental et le transfert instantané jugé secondaire [30]. De façon similaire, nous avons montré que l'équation maîtresse donne naissance à deux unravellings différents. Le premier est un unravelling constitué de trajectoires *continues* alors que le second observe des trajectoires *discontinues* provenant d'une succession de sauts quantiques. Aucun de ces démêlages n'est plus fondamental que l'autre. En effet, il est possible de montrer explicitement que l'équation QJA est un cas limite de l'équation QSD et, inversement, que l'équation QSD peut-être vue comme un cas limite de l'équation QJA [30, 14].

### 3.4.10 Unravelling linéaire

Les équations QSD et QJA ne constituent pas les seuls unravellings de l'équation maîtresse. Par exemple, la méthode des sauts orthogonaux de Diosi [22] est également un unravelling de l'équation maîtresse. Cette section présente un unravelling linéaire.

En omettant les termes non-linéaires de l'équation QSD (3.183), il vient l'équation différentielle stochastique *linéaire*

$$|d\psi\rangle = \left(-\frac{i}{\hbar}H\right)|\psi\rangle dt + \sum_j \left(-\frac{1}{2}L_j^\dagger L_j\right)|\psi\rangle dt + L_j|\psi\rangle d\xi_j, \quad (3.286)$$

qui constitue un unravelling de l'équation de Lindblad (3.49). En effet, nous avons

$$\begin{aligned} d\rho_\psi &= |d\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle d\psi| + |d\psi\rangle\langle d\psi| \\ &= \left[ \left(-\frac{i}{\hbar}H\right) dt + \sum_j \left(-\frac{1}{2}L_j^\dagger L_j\right) dt + L_j d\xi_j \right] \rho_\psi \\ &\quad + \rho_\psi \left[ \left(+\frac{i}{\hbar}H\right) dt + \sum_j \left(-\frac{1}{2}L_j^\dagger L_j\right) dt + L_j^\dagger d\xi_j^* \right] \\ &\quad + L_j \rho_\psi L_j^\dagger d\xi_j^* d\xi_j, \end{aligned} \quad (3.287)$$

avec  $\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ ,  $|\psi\rangle$  étant solution de l'équation linéaire (3.286). En prenant la moyenne statistique de (3.287), nous obtenons un opérateur  $\rho \equiv \mathbb{E}(|\psi\rangle\langle\psi|)$  qui satisfait à l'équation

$$\begin{aligned} d\rho &= \left[ \left(-\frac{i}{\hbar}H\right) dt + \sum_j \left(-\frac{1}{2}L_j^\dagger L_j\right) dt + L_j \mathbb{E}(d\xi_j) \right] \rho \\ &\quad + \rho \left[ \left(+\frac{i}{\hbar}H\right) dt + \sum_j \left(-\frac{1}{2}L_j^\dagger L_j\right) dt + L_j^\dagger \mathbb{E}(d\xi_j) \right] \\ &\quad + L_j \rho L_j^\dagger \mathbb{E}(d\xi_j d\xi_j^*) \\ &= dt \left( -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + dt \sum_j L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2} \rho_S L_j^\dagger L_j - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j \rho \right), \end{aligned} \quad (3.288)$$

<sup>60</sup>Cette question survient dans l'élaboration de théories quantiques alternatives notamment [30].

<sup>61</sup>L'intensité de l'impulsion est alors supposée constante sur le petit intervalle de temps considéré.

qui n'est autre que l'équation de Lindblad.

Il est nettement plus simple de simuler l'unravelling (3.286) car l'équation est linéaire et admet une formulation équivalente en termes d'intégrales de chemin [30]. Cependant, l'équation (3.286) présente un désavantage majeur: elle ne conserve pas la norme<sup>62</sup> ! De plus, si  $|\psi\rangle$  est solution de l'équation (3.286), alors la solution normée associée

$$|\phi\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}} \quad (3.289)$$

n'est *pas* solution de l'équation QSD (3.183) et la moyenne stochastique des  $|\phi\rangle$  ne rend pas l'équation maîtresse de Lindblad. Par conséquent, les solutions de l'unravelling linéaire (3.286) sont des objets purement *mathématiques* n'ayant aucune interprétation *physique*. En particulier, une trajectoire de (3.286) ne représente pas un résultat typique de laboratoire.

---

<sup>62</sup>Cette propriété est facile à vérifier en développant la relation  $d\langle\psi|\psi\rangle = \langle d\psi|\psi\rangle + \langle\psi|d\psi\rangle + \langle d\psi|d\psi\rangle$ .

# Conclusion

Nous clôturons ce mémoire en synthétisant succinctement les concepts clés et les résultats obtenus.

Nous venons de réaliser une synthèse originale de la dynamique stochastique markovienne des systèmes ouverts. Les deux premiers chapitres ont introduit des outils indispensables à l'étude de la dynamique stochastique des systèmes quantiques ouverts markoviens. Au premier chapitre, nous avons rappelé succinctement les notions fondamentales d'opérateur densité et d'opérateur densité réduit. Nous avons également montré pourquoi ces notions sont importantes dans l'étude des systèmes quantiques ouverts. Dans le deuxième chapitre, nous avons introduit un nouveau calcul différentiel: le calcul stochastique. Nous avons commencé par expliciter la notion de différentielle stochastique du mouvement brownien et nous avons donné, sans démonstration, les règles du calcul d'Itô. Ensuite, nous avons montré, sur l'exemple du mouvement brownien, qu'il était possible de construire une équation déterministe à l'aide d'équations stochastiques. Cette équation déterministe porte le nom d'équation de Fokker-Planck. Enfin, nous avons défini un autre type de différentielles stochastiques: les différentielles stochastiques ponctuelles.

Le troisième chapitre constitue le coeur de ce mémoire. Il commence par une définition formelle de la notion de système quantique ouvert. Nous avons démontré, par des arguments essentiellement mathématiques, la forme générale de l'équation maîtresse régissant l'évolution des systèmes quantiques markoviens: l'équation de Lindblad. Cette preuve s'appuie sur les notions d'application dynamique quantique et de générateur de semi-groupe. Ensuite, nous avons clarifié l'interprétation physique de l'équation de Lindblad en la démontrant par une approche microscopique à l'aide de l'approximation de Born-Markov et de l'approximation séculaire. Ces approximations ont ensuite été méticuleusement justifiées.

La deuxième partie du chapitre trois a présenté en détail deux unravellings de l'équation maîtresse markovienne de Lindblad : la diffusion de l'état quantique (QSD) et la méthode des sauts quantiques (QJA). L'introduction de ces deux méthodes stochastiques de résolution de l'équation maîtresse a été motivée. Pour chaque méthode, nous avons démontré l'équation différentielle stochastique associée et nous avons illustré et comparé les principales propriétés des solutions de ces équations sur trois exemples à deux niveaux résolus de façon numérique. Afin de mener à bien la preuve de l'équation QJA, la théorie des mesures non-projectives a été présentée, ce qui nous a permis au passage de démontrer d'une troisième et dernière façon l'équation de Lindblad. Le chapitre trois se termine par un exemple d'un autre unravelling de l'équation maîtresse.

L'entièreté de ce mémoire suppose que les systèmes à l'étude sont markoviens. Cette hypothèse courante est parfois restrictive car certains systèmes, comme les lasers à semi-conducteurs ne peuvent pas être considérés comme markoviens [14]. Les méthodes stochastiques QSD et QJA peuvent alors être étendues au cas non-markovien, auquel cas on parle des méthodes NMQSD (*Non Markovian Quantum State Diffusion*) [42] et NMQJA (*Non Markovian Quantum Jump Approach*) [19]. L'extension naturelle de ce mémoire consiste en l'étude de ces deux méthodes stochastiques non-markoviennes. Notons que la simulation de la méthode NMQSD peut se faire *via* un autre outil numérique, la méthode HOPS (*Hierarchy of Stochastic Pure States*) [41].



# Annexe A

## Codes du chapitre deux

Les codes *Julia* du chapitre deux sont particulièrement simples. Les codes annotés des figures 2.1 et 2.2 sont les suivants.

```
1 # Simulation d'une trajectoire brownienne
2 # Le mouvement brownien est solution de
3 # du = f(u, p, t)dt + g(u, p, t)dW
4 # avec u0 = 0, f(u, p, t) = 0 et g(u, p, t) = 1
5
6 using DifferentialEquations
7 using Plots
8
9 u0=0
10 f(u,p,t) = 0
11 g(u,p,t) = 1
12 dt = 1//2^(10) #dt = pas de temps
13 tspan = (0.0,1.1) #intervalle de temps couvert
14 prob = SDEProblem(f,g,u0,tspan)
15
16 sol = solve(prob, SRIW1(), dt= dt) #SRIW1 est l'alg. de resolution
17 plot(sol, xaxis = "t", yaxis = "W(t)", label = false)
```

```
1 # Resolution du systeme d'equations stochastiques suivant
2 # du1 = a dW
3 # du2 = a dW
4 using Plots; plotly()
5 using DifferentialEquations
6
7 #Parametres
8 a = 1
9 dt = 1//2^(10) #pas de temps
10 ti = 0.0
11 tf = 1.0
12 tspan = (ti, tf) #intervalle de temps couvert
13 nbreTimeStep = floor(Int, 1+(tf-ti)/dt)
14
15 #Definition du probleme de la forme
16 # du = f(u, p, t) + g(u, p, t)*dW
17 # qui se reecrit en termes de composantes
18 # du1 = f1(u, p, t) + g11(u, p, t)dW1 + g22(u, p, t)dW2
19 # du2 = f2(u, p, t) + g21(u, p, t) dW1 + g22(u, p, t)dW2.
20
21 u0= [0.0; 0.0] #condition initiale
22
23 function g(du, u, p, t)
24 du[1] = a
25 du[2] = a
26 end
27
28 function f(du, u, p, t)
```

```
29 du[1] = 0.0
30 du[2] = 0.0
31 end
32
33 prob = SDEProblem(f,g,u0, tspan)
34
35 #Resolvons  $dx = a dW$  et  $dy = adW$ ;
36 #resultats stockes dans 'solution'.
37 #Il suffit alors de tracer les resultats.
38 sol = DifferentialEquations.solve(prob, dt = dt, adaptive=false )
```

# Annexe B

## Codes du chapitre trois

### B.1 Méthode QSD

#### B.1.1 Exemples: mesure de la composante $z$ du spin d'un atome et émission spontanée.

Les codes des deux premiers exemples sont similaires et s'adaptent facilement *via* les remplacements

$$\gamma_m \longleftrightarrow \gamma_e \quad \text{et} \quad \sigma_z \longleftrightarrow \sigma_- . \quad (\text{B.1})$$

Nous présentons le code relatif à l'émission spontanée d'un atome à deux niveaux.

```
1 #Methode QSD
2 #Emission spontanee
3
4 using DifferentialEquations
5 using Plots
6 using DifferentialEquations.EnsembleAnalysis
7 using LinearAlgebra
8 using TensorOperations
9 using BlockArrays
10 using AbstractAlgebra
11 using ZChop
12
13 # Definition des matrices de Pauli
14 pauli0 = [1.0+0.0*im 0.0+0.0*im; 0.0+0.0*im 1.0+0.0*im];
15 paulix = [0.0+0.0*im 1.0+0.0*im; 1.0+0.0*im 0.0+0.0*im];
16 pauliy = [0.0+0.0*im 0.0-1.0*im; 0.0+1.0*im 0.0+0.0*im];
17 pauliz = [1.0+0.0*im 0.0+0.0*im; 0.0+0.0*im -1.0+0.0*im];
18 paulim = [0.0+0.0*im 0.0+0.0*im; 1.0+0.0*im 0.0+0.0*im];
19 paulip = [0.0+0.0*im 1.0+0.0*im; 0.0+0.0*im 0.0+0.0*im];
20
21
22 #Parametres
23 dt = 0.01
24 nbreTrajectoires = 1
25 ti = 0.0
26 tf = 60
27 tspan = (ti, tf)
28 gamma = 0.09
29 nbreTimeStep = floor( Int, 1+(tf-ti)/dt)
30
31
32 #Lindbladien
33 L = \sqrt{gamma}*paulim
34 L_dag = (L')
35
36 #Resolution de l equation differentielle stochastique de la forme
37 # du = f(u, p, t)dt + g(u, p, t)dW
38 # avec la condition intiale u0.
```

```

39 f(u, p, t) = ((u\')*L_dag*u)*L*u .- 0.5*(u\'*L_dag*u)*(u\'*L*u)*u
    .-0.5*L_dag*(L*u)
40 g(u, p, t) = L*u .- ((u\')*(L*u))*u
41 u0 = [1.0+0.0*im; 0.0+0.0*im]
42
43 prob = SDEProblem(f, g, u0, tspan, noise = DiffEqNoiseProcess.
    WienerProcess(0.0, 0.0+0.0*im))
44
45 #La variable paulizMean stocke la valeur moyenne de pauliz
46 #pour toutes les trajectoires.
47 paulizMean = zeros(Float64, nbreTimeStep, nbreTrajectoires)
48 for i in 1:nbreTrajectoires
49     sol = DifferentialEquations.solve(prob, saveat = dt)
50     for j in 1:nbreTimeStep
51         paulizMean[j, i] = real((sol[j])\' *(pauliz*sol[j]))
52     end
53 end
54
55 #La variable population stocke la population de l'etat excite
56 population = zeros(Float64, nbreTimeStep, 1)
57 for j in 1:nbreTimeStep
58     for i in 1:nbreTrajectoires
59         population[j] += 1/2 .* (1 .+ paulizMean[j, i])
60     end
61 end
62
63 display(plot(1/nbreTrajectoires *population, xaxis = "t", yaxis = "P",
    label = "QSD"))
64
65 #Solution analytique pour des pas de temps dt
66 #du type 0.1, 0.01, 0.001, etc.
67 p(t) = exp(-gamma*dt*t)
68
69
70 display(plot!(p, 0:nbreTimeStep, label = "equation maitresse"))

```

La simulation du cas limite défini par l'ajout du lindbladien (3.212) modifie la définition des fonctions  $f(u, p, t)$  et  $g(u, p, t)$  du code précédent de la façon suivante<sup>1</sup>.

```

1 #Deux lindbladiens
2 #Emission spontanee
3 L = gamma_e .* paulim
4 L_dag = L\'
5 L2 = gamma_m .* pauliz
6 L2_dag = L2\'
7 nbreTimeStep = floor(Int, 1+(tf-ti)/dt)
8
9 #Resolution de l'equation differentielle stochastique du type
10 # du = f(u, p, t) + g(u, p, t)*dW,
11 # qui se reecrit en termes de composantes
12 # du1 = f1(u, p, t) + g11(u, p, t)dW1 + g22(u, p, t)dW2
13 # du2 = f(u, p, t) + g21(u, p, t) dW1 + g22(u, p, t)dW2.
14
15 fonction g(du, u, p, t)
16 du[1, 1] = (L*u .- ((u\')*(L*u))*u)[1]
17 du[1, 2] = (L2*u .- ((u\')*(L2*u))*u)[1]
18 du[2, 1] = (L*u .- ((u\')*(L*u))*u)[2]
19 du[2, 2] = (L2*u .- ((u\')*(L2*u))*u)[2]
20 end
21
22 f(du, u, p, t) = du .- (u\'*L_dag*u)*L*u .- 0.5*(u\'*L_dag*u)*(u\'*L*u)*
    u .-0.5*L_dag*(L*u) +

```

<sup>1</sup>Les autres parties du code sont inchangées.

```

23 (u\'*L2_dag*u)*L2*u .- 0.5*(u\'*L2_dag*u)*(u\'*L2*u)*u .-0.5*L2_dag*(
    L2*u)
24
25 u0 = [1.0+0.0*im; 0.0+0.0*im]
26
27
28 #Definition du nouveau probleme a deux lindbladiens.
29 prob = SDEProblem(f, g, u0, tspan, noise_rate_prototype=zeros(2,2)+im*
    zeros(2,2) )
30 sol = DifferentialEquations.solve(prob, dt = dt, adaptive=false )
31
32
33 paulizMean = zeros(Float64, nbreTimeStep, 1)
34
35
36 for j in 1:nbreTimeStep
37     paulizMean[j] = real((sol[j])\' *(pauliz*sol[j]))
38 end
39
40 #Représentation graphique d une trajectoire
41 display(plot(paulizMean, xaxis = "t", yaxis = "< z >", label = false))

```

### Exemple: superradiance

Le code associé à l'étude de la superradiance que nous avons menée est le suivant. Il fonctionne pour un nombre arbitraire d'atomes.

```

1 using DifferentialEquations
2 using Plots
3 using DifferentialEquations.EnsembleAnalysis
4 using LinearAlgebra
5 using TensorOperations
6 using BlockArrays
7 using AbstractAlgebra
8 using ZChop
9 using StochasticDiffEq
10
11 # Definition des matrices de Pauli a deux dimensions
12 pauli0 = [1.0+0.0*im 0.0+0.0*im; 0.0+0.0*im 1.0+0.0*im];
13 paulix = [0.0+0.0*im 1.0+0.0*im; 1.0+0.0*im 0.0+0.0*im];
14 pauliy = [0.0+0.0*im 0.0-1.0*im; 0.0+1.0*im 0.0+0.0*im];
15 pauliz = [1.0+0.0*im 0.0+0.0*im; 0.0+0.0*im -1.0+0.0*im];
16 paulim = [0.0+0.0*im 0.0+0.0*im; 1.0+0.0*im 0.0+0.0*im];
17 paulip = [0.0+0.0*im 1.0+0.0*im; 0.0+0.0*im 0.0+0.0*im];
18
19
20 #Opérateur identité dans l'espace a N atomes a deux niveaux
21 function idN(N::Int64)::Array{Complex{Float64},2}
22     res = Matrix{Complex{Float64}}(I, 2^N, 2^N);
23 end
24
25 #Paramètres
26 N = 6 #nombre d'atomes
27 kappa = 2 #taux de d croissance de la cavite
28 G= 1 #constante de couplage
29 gamma_s = (2*G^2)/ kappa
30 dt = 0.01
31 nbreTrajectoires = 100
32 ti = 0.0
33 tf = 10.0
34 tspan = (0.0, tf)
35 nbreTimeStep = floor( Int, 1+(tf-ti)/dt)
36
37 #Opérateurs de spin collectif et opérateur d'intensité

```

```

38 Sigmap = zeros(Float64, 2^N, 2^N)+ 0*im*zeros(Float64, 2^N, 2^N)
39 Sigmam = zeros(Float64, 2^N, 2^N)+ 0*im*zeros(Float64, 2^N, 2^N)
40 for i in 1:N
41     sp = kron(idN(i-1),paulip,idN(N-i))
42     sm = kron(idN(i-1),paulim,idN(N-i))
43     for j in 1:2^N
44         for k in 1:2^N
45             Sigmap[j, k] = p [j, k] .+ p [j, k]
46             Sigmam[j, k] = m [j, k] .+ m [j, k]
47         end
48     end
49 end
50
51 #Lindbladien
52 L = (\sqrt{gamma_s}* m )
53 L_dag = L\'
54
55 #Resolution de l'equation differentielle stochastique de la forme:
56 # du = f(u, p, t)dt + g(u, p, t)dW
57 # avec la condition intiale u0.
58 f(u, p, t) = (u\'*L_dag*u).*(L*u) .- 0.5*(u\'*L_dag*u).*(u\'*L*u).*u
59             .-0.5*L_dag*(L*u)
60 g(u, p, t) = L*u .- (u\'*L*u).*u
61 u0 = zeros(Float64, 2^N, 1) + im*zeros(Float64, 2^N, 1)
62 u0[1] = 1+0*im #tous les atomes sont initialement excites.
63 prob = SDEProblem(f, g, u0, tspan, noise = DiffEqNoiseProcess.
64             WienerProcess(0.0, 0.0+0.0*im))
65
66 # La variable intensite stocke l'intensite rayonnee
67 # pour toutes les trajectoires
68 intensite = zeros(Float64, nbreTimeStep, nbreTrajectoires)
69
70 for i in 1:nbreTrajectoires
71     local sol = StochasticDiffEq.solve(prob, saveat = dt)
72     for j in 1:nbreTimeStep
73         I = real((sol[j]\'')*(intensiteop_N*sol[j]))
74         intensite[j, i] = I[1]
75     end
76 end
77
78 intensite_somme = zeros(Float64, nbreTimeStep,1)
79
80 #Somme sur toutes les trajectoires
81 for j in 1:nbreTimeStep
82     for i in 1:nbreTrajectoires
83         intensite_somme[j] += intensite[j, i]
84     end
85 end
86
87 open("intensite_mesure.txt","w") do io
88     println(io, intensite_somme)
89 end
90
91 display(plot(1/nbreTrajectoires*intensite_somme, xaxis = "t", yaxis =
92             "I(t)", label = "QSD"))
93
94 #Solution analytique pour N= 4
95 i(t) = exp(-6*dt*t)*(96 + 72*dt*t + 4*exp(2*dt*t)*(-23+36*dt*t))
96
97 #Confrontation des solutions
98 display(plot!(i, 0:nbreTimeStep, label = " quation maitresse"))

```

## B.2 Méthode QJA

Pour simuler la méthode QJA, nous utilisons le package *QuantumOptics.jl*. La documentation de ce package est disponible en ligne.

### B.2.1 Exemple: mesure de la composante $z$ du spin d'un atome et émission spontanée.

A nouveau, nous ne présentons qu'un seul des deux codes en raison de leurs similitudes. Nous choisissons de montrer le code lié à l'émission spontanée.

```

1 using QuantumOptics
2 using Plots
3
4 #Parametres
5 spinbasis = SpinBasis(1/2)
6 gamma = (0.3)^2
7 L = [sqrt(gamma)*sigmam(spinbasis)]
8 psi0 = spinup(spinbasis) #condition intiale
9 H = 0*identityoperator(spinbasis)
10 sz = sigmaz(spinbasis) #opérateur de Pauli
11 ti = 0.0
12 tf = 60
13 dt= 0.01
14 T = [ti:dt:tf;] #intervalle de temps couvert
15 nbreTrajectoires = 100
16 nbreTimeStep = floor( Int, 1+(tf-ti)/dt)
17
18
19 #La variable paulizMean stocke la valeur moyenne de pauliz
20 #pour toutes les trajectoires.
21 paulizMean = zeros(Float64, nbreTimeStep, nbreTrajectoires)
22
23 population = zeros(Float64, nbreTimeStep, 1)
24 for i = 1:nbreTrajectoires
25     tout, \psit = timeevolution.mcwf(T, psi0, H, L; seed=i)
26     population .+= 1/2 .* (1 .+ real(expect(sz, \psit)))
27 end
28
29
30 display(plot(1/nbreTrajectoires *population, xaxis = "t", yaxis = "P",
31             label = "QJA"))
32
33 #Solution analytique
34 p(t) = exp(-\gamma*dt*t)
35
36 display(plot!(p, 0:nbreTimeStep, label = "equation maitresse"))

```

Le cas limite associé à la mesure de la composante  $z$  du spin d'un atome à deux niveaux et défini par les opérateurs  $H'$  et  $L'$  donnés par (3.284) est simulé *via* le code suivant.

```

1 using QuantumOptics
2 using Plots
3
4 #Parametres
5 spinbasis = SpinBasis(1/2)
6 gamma = (0.3)^2
7 c = 10*(1/\sqrt{2}+1/\sqrt{2}*im)
8 L = [gamma*sigmaz(spinbasis) + c*identityoperator(spinbasis)]
9 psi0 = 1/ 2 *(spindown(spinbasis) + spinup(spinbasis))
10 H = -im/2*(conj(c)*sigmaz(spinbasis) - c*sigmaz(spinbasis))
11 sz = sigmaz(spinbasis)
12 ti = 0.0
13 tf = 10.0
14 T = [0:0.005:25;]

```

```

15 nbreTimeStep = floor( Int, 1+(tf-ti)/dt)
16
17
18 tout, \psit= timeevolution.mcwf(T, \psi0, H, L)
19
20 solution = real(expect(sz, \psit))
21
22 plot(solution, xaxis = "t", yaxis = "< z >", label = false)

```

### Exemple: superradiance

Enfin, nous terminons cette section par le code associé à l'étude la superradiance pour la méthode QJA. Comme pour la méthode QSD, il fonctionne pour un nombre arbitraire d'atomes.

```

1  using Plots
2  using QuantumOptics
3  using LinearAlgebra
4  using TensorOperations
5  using BlockArrays
6  using AbstractAlgebra
7  using ZChop
8
9  #Parametres
10 spinbasis = SpinBasis(1/2)
11 sz = sigmaz(spinbasis)
12 psi0 = spinup(spinbasis) #etat initial d'un qubit
13 pauliM = [0.0+0.0*im 0.0+0.0*im; 1.0+0.0*im 0.0+0.0*im];
14 pauliP = [0.0+0.0*im 1.0+0.0*im; 0.0+0.0*im 0.0+0.0*im];
15 ti = 0.0
16 tf = 10
17 dt= 0.01
18 T = [ti:dt:tf;] #intervalle de temps couvert
19 nbreTrajectoires = 10000
20 nbreTimeStep = floor( Int, 1+(tf-ti)/dt)
21 N = 4 #nombre d'atomes
22 kappa = 2 #taux de decroissance de la cavite
23 G= 1 #constante de couplage
24 gamma_s = (2*G^2)/ kappa
25
26 #Definition de la base a N systemes a deux niveaux.
27 base = spinbasis ; 0 = spinup(spinbasis)
28 for i in 1:(N-1)
29     global base = base \otimes spinbasis
30     global \psi0 = \psi0 \otimes spinup(spinbasis)
31 end
32
33
34 #Operateur identite espace a N qubits
35 function idN(N::Int64)::Array{Complex{Float64},2}
36     res = Matrix{Complex{Float64}}(I, 2^N, 2^N);
37 end
38
39 #Definition des representations des operateurs de spins collectifs
40 Sp = zeros(Float64, 2^N, 2^N)+ 0*im*zeros(Float64, 2^N, 2^N)
41 Sm = zeros(Float64, 2^N, 2^N)+ 0*im*zeros(Float64, 2^N, 2^N)
42 for i in 1:N
43     sp = kron(idN(i-1),pauliP,idN(N-i))
44     sm = kron(idN(i-1),pauliM,idN(N-i))
45     for j in 1:2^N
46         for k in 1:2^N
47             Sp[j, k] = Sp[j, k] .+ sp[j, k]
48             Sm[j, k] = Sm[j, k] .+ sm[j, k]
49         end
50     end

```

```

51 end
52
53 #Operateurs associes
54 Sigmam = Operator(base, Sm)
55 Sigmap = Operator(base, Sp)
56
57 #Lindbladien, operateur intensite et hamiltonien
58 L = [\sqrt(\gamma_s)*Sm]
59 intensiteop_N = Sigmap * Sigmam
60 H = 0*identityoperator(base)
61
62 #Calcul de l'intensite rayonnee
63 intensite = zeros(Float64, nbreTimeStep, 1)
64 for i = 1:nbreTrajectoires
65     tout, \psit = timeevolution.mcwf(T, 0, H, L; )
66     intensite .+= real(expect(intensiteop_N, t))
67 end
68
69 plot(1/nbreTrajectoires*intensite, xlabel = "t", ylabel = "I(t)",
70     label = "QJA")
71
72 #Solution analytique pour le cas particulier N=4.
73 i(t) = exp(-6*dt*t)*(96 + 72*dt*t + 4*exp(2*dt*t)*(-23+36*dt*t))
74 display(plot!(i, 0:nbreTimeStep, label = "equation maitresse"))

```

## B.3 Code Mathematica

Nous représentons ci-dessous le code Mathematica qui permet de déterminer la solution analytique de l'intensité superradiante rayonnée dans le cas particulier de 4 atomes en cavité.

Nous commençons par présenter les définitions générales.

```

1 (*Operateurs de Pauli a un atome*)
2 PauliX = {{0, 1}, {1, 0}};
3 PauliY = {{0, -I}, {I, 0}};
4 PauliZ = {{1, 0}, {0, -1}};
5 PauliP = (PauliX + I PauliY)/2;
6 PauliM = (PauliX - I PauliY)/2;
7
8 (*Etats excite et fondamental d'un atome deux niveaux*)
9 (*Base de l'espace d'Hilbert : produit tensoriels des etats atomiques
10 *)
11 \[Psi]e = {1, 0};
12 \[Psi]g = {0, 1};
13
14 (*Operateur identite a un atome*)
15 Id2 = IdentityMatrix[2];
16
17 (*Nombre d'atomes et dimension de l'espace d'Hilbert du systeme S*)
18 n = 4;
19 dimHS = 2^n;
20
21 (*Prolongements des operateurs de Pauli dans l'espace d'Hilbert total
22 du systeme a n atomes*)
23 SZ = SparseArray@
24     Table[KroneckerProduct @@
25           Table[If[i == j, PauliZ, Id2], {j, n}], {i, n}];
26 SP = SparseArray@
27     Table[KroneckerProduct @@
28           Table[If[i == j, PauliP, Id2], {j, n}], {i, n}];
29 SM = SparseArray@
30     Table[KroneckerProduct @@
31           Table[If[i == j, PauliM, Id2], {j, n}], {i, n}];

```

```

31
32 (*Operateurs collectifs associes*)
33 JP = SparseArray@Sum[SP[[i]], {i, 1, n}];
34 JM = SparseArray@Sum[SM[[i]], {i, 1, n}];
35 JZ = SparseArray@Sum[SZ[[i]]/2, {i, 1, n}];
36 JX = (JP + JM)/2;
37 JY = (JP - JM)/(2 I);
38
39 (*Projecteurs sur le multiplet excite et fondamental du systeme de n
40 atomes*)
41 Pe = SparseArray@Sum[SP[[i]] . SM[[i]], {i, 1, n}];
42 Pg = SparseArray@Sum[SM[[i]] . SP[[i]], {i, 1, n}];
43
44 (*Hamiltonien avec hbar=1 et omega0=1*)
45 hbar = 1;
46 omega0 = 1;
47 HS = hbar omega0 JZ;
48
49 (*Matrice densite reduite du syst me en schema d'interaction et sa
50 vectorisation*)
51 rhoS = Table[Subscript[rho, {i, j}][t], {i, dimHS}, {j, dimHS}];
52 vrhoS = Flatten[rhoS];
53
54 (*Operateur de Liouville superradiant applique a rhoS avec
55 \gamma_{ij}=gamma0 pour tout i,j*)
56 HLS = HS;
57 LrhoS = -I (HLS . rhoS - rhoS . HLS) +
58   gamma0 (JM . rhoS . JP - 1/2 JP . JM . rhoS - 1/2 rhoS . JP . JM);
59 vLrhoS = Flatten[LrhoS];

```

L'expression analytique de l'intensité rayonnée est alors obtenue par le code suivant.

```

1 (*Calcul de l'application de l'exponentielle sur l'etat initial*)
2 (*Matrice A du systeme d'equations d(vrhoS)/dt=A.vrhoS*)
3
4 parametres = {V -> 1,
5   gamma0 -> Gamma0, Deltagamma -> DeltaGamma};
6 parametres = {V -> 1, gamma0 -> 1, Deltagamma -> DeltaGamma};
7 conditionsInitiales =
8   Table[(vrhoS[[i]] /. t -> 0) == KroneckerDelta[i, 1], {i, 1,
9     Length[vrhoS]}];
10 etatInitial = Refine[vrhoS /. t -> 0, conditionsInitiales];
11 A = CoefficientArrays[vLrhoS /. parametres, vrhoS][[2]];
12
13 (*Propagateur sur l'etat initial*)
14 sol = MatrixExp[A t, etatInitial] /. parametres;
15 rhoSreshaped = Simplify@ArrayReshape[sol, {dimHS, dimHS}];
16
17 (* Calcul de l'intensite rayonnee *)
18 Int[t] = FullSimplify[-D[Tr[HS . rhoSreshaped], t]]
19 graph1 = Plot[Evaluate[Int[t]], {t, 0, 4}, PlotRange -> All,
20   PlotStyle -> {Black, Thick}]
21 meanJ = FullSimplify[{Tr[JX . rhoSreshaped], Tr[JY . rhoSreshaped],
22   Tr[JZ . rhoSreshaped]}]

```

# Bibliographie

- [1] G.Muga; A.Ruschhaupt; A.Campo. *[Lecture Notes in Physics] Time in Quantum Mechanics II Volume 789 // The Quantum Jump Approach and Some of Its Applications*, volume 10.1007/978-3-642-03174-8. 2009.
- [2] C. Aslangul. *Mécanique quantique (Tome 2)*. De Boeck université, 2008.
- [3] J.S. Bell. *Speakable and unspeakable in quantum mechanics*. Cambridge University Press, 1987.
- [4] T.A. Brun. Continuous measurements, quantum trajectories, and decoherent histories. *Physical Review A*, 61, 3 2000.
- [5] P.Zoller.; M.Marte; D.F.Walls. Quantum jumps in atomic systems. *Physical Review A*, 35, 1 1987.
- [6] R.H. Dicke. Coherence in spontaneous radiation processes. *Phys. Rev.*, 93:99–110, Jan 1954.
- [7] R. Bonifacio; P.Schwendimann; F.Haake. Quantum statistical theory of superradiance. i. *Physical Review A*, 4, 1971.
- [8] H.P. Breuer; F.Petruccione. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press, 2002.
- [9] C.W. Gardiner. Handbook of stochastic methods volume 13 of the Springer series in synergetics. *Journal of the Optical Society of America B Optical Physics*, 1(3):409, June 1984.
- [10] C. Cohen-Tannoudji; J.Dupont-Roc; G.Grynberg. *Atom—Photon Interactions: Basic Process and Applications*. Wiley Science Paper Back Series, 1998.
- [11] R.B. Griffiths. What quantum measurements measure. *Physical Review A*, 96, 9 2017.
- [12] Jerryman Gyamfi. Fundamentals of quantum mechanics in liouville space. *European Journal of Physics*, 41, 06 2020.
- [13] D. Bohm; B.J. Hiley. *The undivided universe: An ontological interpretation of quantum theory*. Routledge, 1993.
- [14] H.M.Wiseman. Quantum trajectories and quantum measurement theory. *Quantum and Semi-classical Optics Journal of the European Optical Society Part B*, 8, 02 1996.
- [15] N.Gisin; G.Ribordy; W.Tittel; H.Zbinden. Quantum cryptography. *Reviews of Modern Physics*, 74(1):145–195, Mar 2002.
- [16] J.A.Gyamfi. Fundamentals of quantum mechanics in liouville space. *European Journal of Physics*, 06 2020.
- [17] C.Cohen-Tannoudji; J.Dalibard. Single-atom laser spectroscopy. looking for dark periods in fluorescence light. *EPL (Europhysics Letters)*, 1, 05 1986.
- [18] L.Allen; J.Eberly. *Optical Resonance and Two-level Atoms*. Dover, 1987.
- [19] J.Piilo and S.Maniscalco; K.Härkönen; K.A. Suominen. Non-markovian quantum jumps. *Physical Review Letters*, 100(18), May 2008.
- [20] K.Itô. Stochastic integral. *Proc. Imp. Acad.*, 20(8):519–524, 1944.
- [21] M.B. Plenio; P.L. Knight. The quantum-jump approach to dissipative dynamics in quantum optics. *Review of Modern Physics*, 70, 1 1998.
- [22] L.Diósi. Stochastic pure state representation for open quantum systems. *Physics Letters A*, 114(8-9):451–454, Mar 1986.
- [23] Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Commun. Math. Phys.*, 47, 1976.

- [24] M.Gell-Mann. *Questions for the Future*. Oxford University Press, 1981.
- [25] N.Gisin and R.Thew. Quantum communication. *Nature Photonics*, 1(3):165–171, Mar 2007.
- [26] W.T. Strunz.; L.Diósi; N.Gisin. Open system dynamics with non-markovian quantum trajectories. *Physical Review Letters*, 82, 3 1999.
- [27] M.A. Nielsen and I.L. Chuang. *Quantum computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- [28] I.C. Percival. Localization of wide-open quantum systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General Physics*, 27, 02 1994.
- [29] I.C. Percival. Primary state diffusion. *Proceedings Mathematical Physical Engineering Sciences*, 447, 10 1994.
- [30] I.C. Percival. *Quantum state diffusion*. Cambridge University Press, 1998.
- [31] N.Gisin; I.C. Percival. The quantum-state diffusion model applied to open systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General Physics*, 25, 11 1992.
- [32] Hille; Philips. *Functional analysis and semigroups*, volume 31 of *Colloquium Publications*. American Mathematical Society, 1987.
- [33] K.Head-Marsden; S.Krastanov; D.Mazziotti; P.Narang. Capturing non-markovian dynamics on near-term quantum computers. *Physical Review Research*, 3(1), Feb 2021.
- [34] P.Pearle. Reduction of the state vector by a nonlinear schrödinger equation. *Physical Review D*, 13, 1976.
- [35] R.Alicki. [*Lecture Notes in Physics*] *Quantum Dynamical Semigroups and Applications Volume 717 // General Theory and Applications to Unstable Particles*, volume 10.1007/3-540-70861-8. 2007.
- [36] I.Karatzas; S.E. Shreve. *Brownian Motion and Stochastic Calculus*. Graduate Texts in Mathematics. Springer, 1 edition, 1987.
- [37] Herbert Spohn. Kinetic equations from hamiltonian dynamics: Markovian limits. *Review of Modern Physics*, 52, 1980.
- [38] R. Dümcke; H. Spohn. The proper form of the generator in the weak coupling limit. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 34, 1979.
- [39] Gorini; Kassakowski; Sudarshan. Completely positive dynamical semigroups of n-level systems. *J.Math.Phys*, 17, 1976.
- [40] G.C. Ghirardi; A.Rimini; T.Weber. Unified dynamics for microscopic and macroscopic systems. *Physical Review D*, 34, 7 1986.
- [41] D.Suess; A.Eisfeld; W.T.Strunz. Hierarchy of stochastic pure states for open quantum system dynamics. *Physical Review Letters*, 113, 10 2014.
- [42] L.Diósi; N.Gisin; W.T.Strunz. Non-markovian quantum state diffusion. *Physical Review A*, 58(3):1699–1712, Sep 1998.