



Introduction au Calcul Quantique

2. Le formalisme quantique du qubit

Edouard Marchais^a

^aEPITA, 14-16 Rue Voltaire, 94270 Le Kremlin-Bicêtre, France.

E-mail: edouard.marchais@epita.fr

ABSTRACT: Le formalisme et les notions fondamentales de la mécanique quantique, nécessaires à la description du qubit, sont abordés. En premier lieu, la notion de vecteur d'état appartenant à un espace de Hilbert est décrite en relation avec le besoin de modélisation physique. Ensuite, la notion d'opérateur permettant de transformer l'état d'un qubit est discuté, ainsi que la notion d'observable en relation avec la mesure d'une grandeur physique réelle. Enfin l'équation de Schrödinger est introduite afin de décrire quantitativement la transformation dans le temps d'un qubit ce qui sera utilisé ultérieurement en calcul quantique.

Table des Matières

1	La notion d'état quantique	2
1.1	Espace des états	2
1.2	Amplitude et probabilité	3
1.3	La mesure quantique	4
2	La notion d'opérateur	5
2.1	Opérateur de projection	6
2.2	Relation de commutation	7
2.3	Opérateur hermitien et décomposition spectrale	8
3	Évolution dans le temps	9
3.1	Moment angulaire quantique	9
3.2	Équation d'évolution	13
3.3	Oscillations de Rabi	15
A	Interaction d'un spin $1/2$ avec un champ magnétique	17
B	Solution de l'équation d'évolution	18
C	Exercices	19
C.1	Opérateur de rotation pour le spin $1/2$	19
C.2	Oscillation de Rabi hors résonance	19

1 La notion d'état quantique

Introduction Précédemment on a vu que l'impossibilité expérimentale de distinguer le chemin pris par un photon, nous a conduit à la notion d'amplitude de probabilité. Cette notion d'amplitude s'est avérée plus fondamentale que celle de probabilité elle-même et c'est à partir d'elle que nous avons retrouvé la loi de Malus classique.

Un deuxième aspect important que nous avons soulevé est que l'indiscernabilité du chemin suivi par un photon individuel conduit également à modéliser le chemin suivi comme étant une superposition des chemins possibles indiscernables. À cet égard, c'est la superposition ou l'addition des amplitudes de probabilités qui s'est avérée l'opération mathématique correcte à effectuer.

Comme chaque chemin était associé à une polarisation spécifique, on est conduit à modéliser l'état de polarisation d'un photon donné, servant de support à un bit d'information, comme la superposition linéaire d'états purs de polarisation. Ces états purs correspondent simplement au polarisation selon Ox et selon Oy dans notre exemple.

À travers cet exemple de la polarisation quantique d'un photon, on commence à deviner une structure mathématique sous-jacente que l'on va maintenant détailler.

1.1 Espace des états

Espace linéaire La linéarité des opérations de superposition impose naturellement d'utiliser un espace linéaire afin de décrire la polarisation d'un photon. Cet espace linéaire n'est autre qu'un espace vectoriel de dimension finie $\mathcal{H}$ dont les vecteurs de base correspondent aux états purs que nous avons identifiés. Comme nous avons choisis deux directions de polarisation privilégiées, Ox et Oy , on va donc leur associer une base de deux vecteurs $\{|x\rangle, |y\rangle\}$. Donc n'importe quel état de polarisation $|\Phi\rangle$ correspond donc à un vecteur appartenant à $\mathcal{H}$ et pouvant donc se décomposer selon :

$$|\Phi\rangle = \lambda |x\rangle + \mu |y\rangle \quad (1.1)$$

Au passage, on note que nous utilisons la notation de Dirac afin de représenter les vecteurs appartenant à l'espace $\mathcal{H}$. L'utilité de celle-ci va devenir claire sans ce qui suit.

État de polarisation On a vu qu'il existait différents types de polarisations et qu'ils pouvaient être représentés par un vecteur complexe. Cette aspect est également présent dans notre description quantique de l'état $|\Phi\rangle = \lambda |x\rangle + \mu |y\rangle$ puisque les coefficients λ et μ peuvent être complexes également. L'espace $\mathcal{H}$ est donc un espace vectoriel complexe de dimension deux. Cette complexification implique que de nouvelles opérations sont possibles, on peut notamment prendre le conjugué d'un vecteur appartenant à $\mathcal{H}$. Dans la notation de Dirac, le conjugué de (1.1) se note

$$\overline{|\Phi\rangle} = \langle\Phi| = \bar{\lambda} \langle x| + \bar{\mu} \langle y| \quad (1.2)$$

où $\bar{\lambda}$ et $\bar{\mu}$ sont les complexes conjugués de λ et μ . Si on en revient à la polarisation, une polarisation rectiligne sera décrite par des coefficients réels tandis que pour les polarisations elliptique et circulaire ceux-ci seront complexes.

Produit scalaire En prenant en compte ce formalisme d'espace vectoriel on peut maintenant écrire une amplitude de probabilité comme un produit scalaire de deux vecteurs appartenant à $\mathcal{H}$. Par exemple si on considère un état $|\Psi\rangle = \nu |x\rangle + \sigma |y\rangle$ avec ν, σ complexes alors le produit scalaire de ce vecteur avec $|\Phi\rangle$ s'écrit

$$\langle\Psi|\Phi\rangle = \left(\bar{\nu} \langle x| + \bar{\sigma} \langle y|\right) \left(\lambda |x\rangle + \mu |y\rangle\right) = \bar{\nu}\lambda \langle x|x\rangle + \bar{\sigma}\mu \langle y|y\rangle \quad (1.3)$$

Les vecteurs de base sont **orthogonaux** entre eux par rapport à ce produit scalaire et ils sont de **norme unité**, on a donc les règles (bien connues) suivantes :

$$\langle x|x \rangle = \langle y|y \rangle = 1 \quad \text{et} \quad \langle x|y \rangle = \langle y|x \rangle = 0 \quad (1.4)$$

Ceci permet d'écrire finalement que

$$\langle \Psi|\Phi \rangle = \bar{\nu}\lambda + \bar{\sigma}\mu = \overline{\langle \Phi|\Psi \rangle} \quad (1.5)$$

Ce produit scalaire est **linéaire** par rapport à $|\Phi\rangle$ mais il est **antilinéaire** par rapport à $|\Psi\rangle$.

Norme Le **produit scalaire**, qui nous a servi à construire une *amplitude de probabilité* $a = \langle \Psi|\Phi \rangle$, induit une **norme** sur l'espace $\mathcal{H}$. Dans ce sens la norme au carré d'un vecteur $|\Phi\rangle$ s'écrit comme le produit scalaire de $|\Psi\rangle$ avec son conjugué $\langle \Phi|$, c'est à dire

$$\|\Phi\|^2 = \langle \Phi|\Phi \rangle = |\lambda|^2 + |\mu|^2 \quad (1.6)$$

On impose également (par commodité) qu'un *état physique* représenté par un vecteur $|\Phi\rangle$ soit **normalisé**, c'est-à-dire dire tel que :

$$\|\Phi\|^2 = \langle \Phi|\Phi \rangle = |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \quad (1.7)$$

Cette **condition de normalisation**, bien qu'arbitraire, permet d'interpréter plus facilement le carré de l'*amplitude de probabilité* $a^2 = |\langle \Psi|\Phi \rangle|^2$ comme une **probabilité**, c'est-à-dire une nombre compris entre 0 et 1.

Espaces de Hilbert L'*espace vectoriel complexe de dimension finie* que l'on a construit correspond en fait à un type bien particulier d'espace vectoriel abstrait appelé **Espace de Hilbert**. Un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ est en fait un espace vectoriel complexe, **pas forcément de dimension finie**, muni d'un *produit scalaire* (induisant une *norme* et donc une *distance* entre les éléments de $\mathcal{H}$) et qui est **complet**.

Cette propriété de *complétude* indique que toute *suite de Cauchy* d'éléments pris dans $\mathcal{H}$ converge également dans $\mathcal{H}$. Une *suite de Cauchy* est, de manière heuristique, une suite dont les éléments deviennent de *plus en plus proche* au fur et à mesure que la suite *progresses*. Cependant on notera qu'un **espace de Hilbert de dimension finie** est **toujours complet**.

Enfin on remarque que la finitude de la dimension de $\mathcal{H}$ est due, dans notre cas, au fait que l'on ne peut **mesurer expérimentalement que deux types de polarisation** (selon Ox et Oy). Si l'on cherchait à mesurer des **grandeurs physiques différentes** telles que la *vitesse* ou la *position* d'une particule quantique, on devrait dans ce cas utiliser un *espace de Hilbert de dimension infinie* pour décrire toutes les vitesses ou positions possibles prises par la particule en question.

1.2 Amplitude et probabilité

Calcul d'amplitude Les **états de polarisation** sont donc représentés par des *vecteurs unitaires* (de norme unité) dans l'espace $\mathcal{H}$. Un **état de polarisation rectiligne** (ou linéaire) selon θ , noté $|\theta\rangle$, peut donc s'écrire :

$$|\theta\rangle = \cos \theta |x\rangle + \sin \theta |y\rangle \quad (1.8)$$

où l'on voit que l'on retrouve les **états purs de polarisation** $|x\rangle$ et $|y\rangle$ en choisissant $\theta = 0$ et $\theta = \pi/2$ respectivement. En utilisant la notation de Dirac, on peut alors calculer l'**amplitude de probabilité**

pour qu'un photon polarisé suivant θ traverse un polariseur orienté suivant α de manière suivante :

$$\begin{aligned} a(\theta \rightarrow \alpha) &= \langle \alpha | \theta \rangle \\ &= \left(\cos \alpha \langle x | + \sin \alpha \langle y | \right) \left(\cos \theta |x\rangle + \sin \theta |y\rangle \right) \\ &= \cos \alpha \cos \theta + \sin \alpha \sin \theta \\ &= \cos(\theta - \alpha) \end{aligned}$$

À travers ce calcul simple on voit que mesurer l'amplitude de probabilité on a projeté le vecteur d'état de polarisation du photon $|\theta\rangle$ sur le vecteur $|\alpha\rangle$ qui l'orientation du polariseur.

Probabilité À la suite du calcul précédent, on voit que la **probabilité de traverser l'analyseur** s'exprime donc comme de module au carré de cette amplitude :

$$P(\theta \rightarrow \alpha) = \cos^2(\theta - \alpha) = |\langle \alpha | \theta \rangle|^2 \quad (1.9)$$

Dite de manière différente $P(\theta \rightarrow \alpha)$ représente la **probabilité de mesurer un photon polarisation selon α** alors que sa polarisation de départ était selon θ .

De manière générale, l'**amplitude de probabilité** et la **probabilité** de trouver un état $|\Phi\rangle$ dans un autre état $|\Psi\rangle$ s'expriment selon

$$a(\Phi \rightarrow \Psi) = \langle \Psi | \Phi \rangle \quad \text{et} \quad P(\Phi \rightarrow \Psi) = |\langle \Psi | \Phi \rangle|^2 \quad (1.10)$$

On voit ici que l'on ne spécifie *pas de grandeur physique à mesurer en particulier* (comme la polarisation), on parle simplement de probabilité qu'une **particule quantique** soit dans l'état $|\Psi\rangle$ alors qu'elle était, à un **instant précédent**, dans un état différent $|\Phi\rangle$.

On notera au passage qu'un **vecteur d'état est bien défini à une phase près**, comme la polarisation, puisque le fait de remplacer un vecteur $|\Phi\rangle$ par $|\Phi'\rangle = e^{i\delta}|\Phi\rangle$ laisse **inchangée** la probabilité $|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2$.

1.3 La mesure quantique

Introduction On va maintenant aborder le problème central de la « *mesure* » en physique quantique qui repose sur les notions de **préparation d'un état (quantique)** et de **test**. On reprend le système *polariseur/analyseur* avec, cette-fois ci, l'**analyseur** orienté **selon Ox** . Le **polariseur (P)** va **préparer** l'état quantique (du photon) puis l'**analyseur (A)** va **tester** cet état (sa *polarisation*). Si P_s est la **probabilité de sortie** du photon de (A) alors :

i) (P) est selon $Ox \Rightarrow P_s = 100\% \Rightarrow$ Résultat : 1

ii) (P) est selon $Oy \Rightarrow P_s = 0\% \Rightarrow$ Résultat : 0

Ces résultats se comprennent facilement en terme de projection puisque l'état $|x\rangle$ est **orthogonal** à $|y\rangle$. Ce test permet de **connaître la polarisation** (d'un photon) mais ce n'est *pas le cas le plus général* !

Polarisation arbitraire Supposons que le **polariseur** soit orienté selon la **direction θ** ou sa **direction orthogonale $\theta_\perp$** . On peut donc construire un **système orthonormé** de vecteur de base $\{|\theta\rangle, |\theta_\perp\rangle\}$ à partir de la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$:

$$|\theta\rangle = \cos \theta |x\rangle + \sin \theta |y\rangle \quad \text{et} \quad |\theta_\perp\rangle = -\sin \theta |x\rangle + \cos \theta |y\rangle \quad (1.11)$$

Ici le **polariseur prépare** le photon dans l'état $|\theta\rangle$ alors que l'**analyseur** est selon Ox , on a donc maintenant :

$$P_s = \cos^2 \theta. \quad (1.12)$$

Après le passage du photon par l'analyseur, son état de polarisation n'est plus $|\theta\rangle$ mais $|x\rangle$, on résume souvent ce changement par la phrase

« La mesure modifie (ou perturbe) l'état de polarisation »

En fait, l'analyseur mesure la propriété physique suivante : « polarisation suivant Ox ». Il faut faire attention : l'état $|x\rangle$ ne préexiste pas à cette mesure puisque le photon était dans l'état $|\theta\rangle$.

On notera que si la polarisation est elliptique avec $\lambda = \cos \theta$ et $\mu = \sin \theta e^{i\delta}$ alors la probabilité de réussite du test reste inchangée et on obtient toujours (1.12). Le test ne permet donc pas de mesurer la polarisation de manière non ambiguë, c'est-à-dire qu'on ne sait pas si celle-ci est rectiligne, circulaire ou elliptique.

Différence entre mesures quantique et classique À travers l'exemple que l'on vient de donner, on voit bien qu'il n'existe pas, pour un état quantique arbitraire donné, une manière de mesurer celui-ci « à coup sûr » dans un autre état. On ne peut calculer que la probabilité pour une telle mesure et c'est ce qu'exprime le résultat (1.12).

On voit ici qu'il existe une différence de principe entre la mesure en physique classique et la mesure en physique quantique :

- Dans la cas classique la quantité physique préexiste à la mesure. En effet si une voiture est contrôlée à 180 km.h^{-1} , cette vitesse préexistait par rapport au moment de la mesure (d'où la verbalisation...).
- Dans le cas quantique, l'état de polarisation $|x\rangle$ n'existait pas avant que celui-ci soit mesuré. Avant la mesure, le photon a été préparé par le polariseur dans l'état de polarisation $|\theta\rangle$.

Si reprend l'exemple de la voiture dans une version quantique, son « état de vitesse » $|v\rangle$ ¹ serait alors donnée par la superposition d'un état à 120 km.h^{-1} et d'un autre état à 180 km.h^{-1} , soit

$$|v\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |120 \text{ km.h}^{-1}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |180 \text{ km.h}^{-1}\rangle \quad (1.13)$$

On mesurerait alors une vitesse de 120 km.h^{-1} avec une probabilité de $1/3$ et une vitesse de 180 km.h^{-1} avec une probabilité de $2/3$. Cependant aucun de ces deux résultats n'existaient avant la mesure !

Résumé Dans cette section nous avons formaliser la notion d'état quantique. Un tel état est vu comme un vecteur dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ et dans le cas d'un état correspondant à un qubit, cet espace est de dimension deux. Le vecteur d'état est ensuite utilisé pour construire des amplitudes de probabilité puis des probabilités servant à d'écrire les résultats expérimentaux mettant en jeu des grandeurs physiques quantiques. Notamment, l'opération de mesure correspond à une opération de projection d'un vecteur d'état sur une base orthonormée de $\mathcal{H}$.

2 La notion d'opérateur

Introduction Le cas particulier de la polarisation d'un photon nous a servi de premier exemple afin de discuter de la notion d'état quantique. On a vu que cet état pouvait se modéliser comme un vecteur d'état appartenant à un espace de Hilbert de dimension deux. Maintenant nous allons

¹Il est bien évidemment impossible de construire un tel état avec un objet de la taille d'une voiture.

nous intéresser à comment un tel état quantique peut se **transformer** sous l'effet d'*opérateurs* qui prendront la forme, en dimension deux, de **matrices** agissant dans un espace de Hilbert.

On notera au passage que d'autres systèmes physiques similaires, dits à *deux niveaux*, sont également décrits par le **même type d'espace** de Hilbert et peuvent donc, à ce titre, servir de **support au qubit**. Nous allons donc essayer, en premier lieu, de formaliser (un peu) les principes que nous avons discutés précédemment afin de pouvoir utiliser ce formalisme quel que soit le support physique choisi.

Principes En reprenant l'analyse de la structure mathématique nécessaire à la description d'un état quantique on peut formuler deux principes importants résumant notre approche :

- (I) L'*état physique* d'un **système quantique** est représenté par un **vecteur** $|\Phi\rangle$ appartenant à un **espace de Hilbert**, noté $\mathcal{H}$. Cet espace est **généralement** de dimension *infinie* mais, dans le cas de l'*informatique quantique*, on peut rester dans le cas *fini*. Sauf mention contraire, $|\Phi\rangle$ sera choisi **unitaire** ($\|\Phi\|^2 = 1$) et s'appellera *vecteur d'état* du **système quantique**.
- (II) Soient $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ deux états physiques. Dans ce cas l'**amplitude de probabilité** de trouver Φ dans Ψ est $a(\Phi \rightarrow \Psi) = \langle \Phi | \Psi \rangle$. La **probabilité** pour Φ de réussir le test Ψ est alors

$$P(\Phi \rightarrow \Psi) = |a(\Phi \rightarrow \Psi)|^2 = |\langle \Psi | \Phi \rangle|^2 \quad (2.1)$$

Pour réaliser le test, on doit d'abord *préparer* le système, dans l'**état** $|\Phi\rangle$ à l'aide d'un dispositif (par exemple à l'aide d'un polariseur). Puis on va *tester* le système via un autre dispositif (par exemple l'analyseur), ce qui va mettre le système dans l'**état** $|\Psi\rangle$.

2.1 Opérateur de projection

Mesure et Projection Dans le **test précédent** on a effectué, du point de vue mathématique, une *projection orthogonale* sur $|\Psi\rangle$. Cette opération de projection se fait grâce à un *opérateur* qui va agir sur le vecteur d'état $|\Phi\rangle$. Cet opérateur, dans notre cas, va prendre la forme d'une matrice complexe 2×2 agissant dans $\mathcal{H}$. Si on note $\mathcal{P}_\Psi$ cet opérateur de projection sur l'état $|\Psi\rangle$, l'action de projection de l'état $|\Phi\rangle$ sur l'état $|\Psi\rangle$ s'écrit formellement :

$$|\mathcal{P}_\Psi \Phi\rangle \equiv \mathcal{P}_\Psi |\Phi\rangle = |\Psi\rangle \langle \Psi | \Phi \rangle = (|\Psi\rangle \langle \Psi |) |\Phi\rangle \quad (2.2)$$

On voit que le nouveau vecteur que l'on obtient est « orienté » selon $|\Psi\rangle$ car la quantité $\langle \Psi | \Phi \rangle$ est un *produit scalaire* et donc simplement un nombre (complexe). On peut donc écrire cet opérateur de projection, ou **projecteur**, sous la forme :

$$\mathcal{P}_\Psi = |\Psi\rangle \langle \Psi| \quad (2.3)$$

En résumé, une **mesure physique** est associée à l'opération (mathématique) de *projection*² dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Comme cette projection est effectuée par l'action d'un opérateur sur un état, une **mesure quantique** est donc généralement associée à un **opérateur** agissant dans l'*espace des états* $\mathcal{H}$.

Projecteurs et relation de fermeture Afin de construire plus explicitement le projecteur $\mathcal{P}$ (ou matrice de projection) il faut introduire une base spécifique dans $\mathcal{H}$. On a vu précédemment que la *polarisation* pouvait s'exprimer dans la **base** $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ que l'on peut définir, sans perte de généralité, comme étant la base canonique, c'est-à-dire

$$\{|x\rangle, |y\rangle\} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \quad (2.4)$$

²L'opération de projection est aussi appelée « réduction du vecteur d'état » ou « réduction du paquet d'onde ».

Dans cette base on a les **projecteurs** (sur les états purs $|x\rangle$ et $|y\rangle$) suivants :

$$\mathcal{P}_x = |x\rangle\langle x| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_y = |y\rangle\langle y| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

On remarque que la **somme de ces projecteurs** permet d'obtenir l'« opérateur identité $\mathcal{I}$ » selon :

$$\mathcal{P}_x + \mathcal{P}_y = |x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathcal{I} \quad (2.6)$$

Il s'agit d'un **cas particulier** d'une relation générale, appelée *relation de fermeture*, qui est vraie pour toute collection de projecteur $\mathcal{P}_i$ sur un vecteur de base $|i\rangle$ avec une **base orthonormée** $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle$ d'un **espace de Hilbert à N dimensions** :

$$\sum_{i=1}^N \mathcal{P}_i = \sum_{i=1}^N |i\rangle\langle i| = \mathcal{I} \quad \text{avec} \quad \langle i|j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \quad (2.7)$$

2.2 Relation de commutation

Relation de commutation entre opérateurs Un autre type relation importante entre opérateurs agissant dans $\mathcal{H}$ sont les **relations de commutation**. Dans le cas des opérateurs $\mathcal{P}_x$ et $\mathcal{P}_y$ introduit précédemment, le **commutateur** entre ces deux opérateurs est nul puisque on vérifie que

$$[\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y] \equiv \mathcal{P}_x \mathcal{P}_y - \mathcal{P}_y \mathcal{P}_x = 0 \quad (2.8)$$

On parle des **tests $|x\rangle$ et $|y\rangle$** comme étant *compatibles*, c'est-à-dire que l'on peut mesurer une polarisation selon Ox et selon Oy **simultanément**. On peut tester cette *compatibilité* avec d'autres opérateurs. Prenons par exemple les **opérateurs de projections** sur les états

$$|\theta\rangle = \cos \theta |x\rangle + \sin \theta |y\rangle \quad \text{et} \quad |\theta_\perp\rangle = \sin \theta |x\rangle - \cos \theta |y\rangle \quad (2.9)$$

Dans ce cas, on calcule que

$$\mathcal{P}_\theta = |\theta\rangle\langle\theta| = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta & \sin \theta \cos \theta \\ \sin \theta \cos \theta & \sin^2 \theta \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_{\theta_\perp} = |\theta_\perp\rangle\langle\theta_\perp| = \begin{pmatrix} \sin^2 \theta & -\sin \theta \cos \theta \\ -\sin \theta \cos \theta & \cos^2 \theta \end{pmatrix}$$

On peut vérifier rapidement que $[\mathcal{P}_\theta, \mathcal{P}_{\theta_\perp}] = 0$, cependant :

$$[\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_\theta] = \begin{pmatrix} 0 & \sin \theta \cos \theta \\ -\sin \theta \cos \theta & 0 \end{pmatrix} \neq 0 \quad (2.10)$$

Il n'est donc pas possible de mesurer simultanément la polarisation selon Ox et selon θ . Autrement dit les **tests $|x\rangle$ et $|\theta\rangle$** sont *incompatibles*. De manière générale on peut dire que des propriétés (quantiques) qui ont des opérateurs associés qui ne commutent pas sont **incompatibles** et ne peuvent pas être mesurées **simultanément**.

Ensemble d'opérateurs commutants Dans notre exemple précédent, on peut noter que les **projecteurs $\mathcal{P}_x, \dots, \mathcal{P}_{\theta_\perp}$** représentent en fait les *propriétés* d'un système quantique. Ici il ne s'agit que d'opérateurs liés à la **polarisation d'un photon** selon les **axes $x, \dots, \theta_\perp$** cependant, on peut imaginer une collection **bien plus grande** d'opérateurs correspondants aux différentes grandeurs physiques caractérisant un système.

Cette remarque est fondamentale puisqu'elle indique que pour décrire une **grandeur physique** telle que la polarisation, la vitesse, la position, le spin, etc... il suffit d'introduire un **opérateur agissant dans l'espace des états** correspondant à cette grandeur. On devrait donc pouvoir construire un opérateur *position, vitesse* ou *spin* attaché à chacune de ces grandeurs mesurables expérimentalement. Si un ensemble d'opérateurs commutent entre eux et vérifient une *relation de fermeture* telle que (2.7) alors on parle d'**ensemble complets d'opérateur commutants (E.C.O.C)**. Les ensembles $\{\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y\}$ et $\{\mathcal{P}_\theta, \mathcal{P}_{\theta_\perp}\}$ sont des E.C.O.C.

2.3 Opérateur hermitien et décomposition spectrale

Valeur moyenne d'un opérateur Pour des développements ultérieurs, il est utile de remarquer que la **connaissance des probabilités de réussite** d'un test $\mathcal{T}$ permet de définir une *valeur moyenne* $\langle \mathcal{T} \rangle$

$$\langle \mathcal{T} \rangle = 1 \times P(\mathcal{T} = 1) + 0 \times P(\mathcal{T} = 0) = P(\mathcal{T} = 1) \quad (2.11)$$

Par exemple si le test $\mathcal{T}$ correspond au fait de **tester si un état $|\Psi\rangle$ peut se trouver dans un état $|\Phi\rangle$** , alors

$$P(\Psi) = |\langle \Psi | \Phi \rangle|^2 = \langle \Phi | \Psi \rangle \langle \Psi | \Phi \rangle = \langle \Phi | (|\Psi\rangle \langle \Psi|) \Phi \rangle = \langle \Phi | \mathcal{P}_\Psi \Phi \rangle \quad (2.12)$$

Il est d'usage en **physique quantique** d'appeler *valeur moyenne d'un opérateur $\mathcal{M}$ dans l'état $|\Phi\rangle$* la quantité

$$\langle \Phi | \mathcal{M} \Phi \rangle \equiv \langle \mathcal{M} \rangle_\Phi \quad (2.13)$$

Au test $\mathcal{T} = |\Phi\rangle$ on peut donc associer le projecteur $\mathcal{P}_\Psi$ dont la valeur moyenne dans l'état Φ donne, suivant (2.12), la probabilité de réussite du test.

Construction d'un opérateur hermitien et propriétés physiques La généralisation de cette observation permet de construire des **propriétés physiques** d'un système quantique à partir de **projecteurs**. Donnons un exemple en revenant au cas de la *polarisation*. Supposons que nous construisions (de façon tout à fait *arbitraire*) une propriété $\mathcal{M}$ d'un photon γ de la manière suivante

$$\mathcal{M} = \begin{cases} +1 & \text{si } \gamma \text{ est polarisé selon } Ox \\ -1 & \text{si } \gamma \text{ est polarisé selon } Oy \end{cases} \quad (2.14)$$

On peut associer à la propriété physique $\mathcal{M}$ l'**opérateur hermitien** $\mathcal{M}$

$$\mathcal{M} = \mathcal{P}_x - \mathcal{P}_y \quad (2.15)$$

qui vérifie bien

$$\mathcal{M}|x\rangle = +|x\rangle \quad \text{et} \quad \mathcal{M}|y\rangle = -|x\rangle \quad (2.16)$$

La **valeur moyenne** de $\mathcal{M}$ est par définition

$$\langle \mathcal{M} \rangle = (+1) \times P(\mathcal{M} = +1) + (-1) \times P(\mathcal{M} = -1) \quad (2.17)$$

Pour un **photon dans l'état $|\theta\rangle$** , alors la valeur moyenne $\langle \mathcal{M} \rangle_\theta$ dans l'état $|\theta\rangle$ devient

$$\langle \mathcal{M} \rangle_\theta = \langle \theta | \mathcal{P}_x \theta \rangle - \langle \theta | \mathcal{P}_y \theta \rangle = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta = \cos(2\theta) \quad (2.18)$$

L'opérateur $\mathcal{M}$ construit ci-dessus est un **opérateur hermitien** avec la propriété suivante³

$$\mathcal{M}_{ij} = \overline{\mathcal{M}_{ji}} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathcal{M} = \mathcal{M}^\dagger \quad (2.19)$$

De façon générale, les propriétés physiques en mécanique quantique sont représentées mathématiquement par des **opérateurs hermitiens** ou **auto-adjoints**, souvent appelés *observables*, dont les *valeurs propres* sont **réelles**.

³Il s'agit des opérations de *conjugaison complexe* et de *transposition* d'une matrice effectuées simultanément.

Décomposition spectrale Nous avons construit $\mathcal{M}$ à partir de projecteurs, mais réciproquement on peut construire les projecteurs à partir d'un opérateur hermitien $\mathcal{M}$ grâce au **théorème de décomposition spectrale** que nous énonçons sans démonstration :

Si $\mathcal{M}$ est un opérateur hermitien on peut alors écrire $\mathcal{M}$ en fonction d'un ensemble de projecteurs $\mathcal{P}_n$ vérifiant les trois relations suivantes

$$\mathcal{M} = \sum_n a_n \mathcal{P}_n \quad \mathcal{P}_n \mathcal{P}_m = \mathcal{P}_n \delta_{nm} \quad \sum_n \mathcal{P}_n = \mathcal{I} \quad (2.20)$$

où les coefficients réels a_n sont les **valeurs propres** de $\mathcal{M}$. Les projecteurs $\mathcal{P}_n$ sont **orthogonaux** entre eux (mais en général ils projettent sur un sous-espace de $\mathcal{H}$ et non sur un seul vecteur de $\mathcal{H}$) et leur somme est l'**opérateur identité**. En résumé, les propriétés physiques d'un système quantique sont représentées mathématiquement par des **opérateurs hermitiens**. La mesure d'une propriété physique $\mathcal{M}$ a pour résultat une des **valeurs propres** de l'opérateur $\mathcal{M}$.

Résumé Dans cette section nous avons introduit la notion d'**opérateur** dans un *espace de Hilbert*. Le rôle des opérateurs est de permettre la **transformation** d'un état quantique en un autre. De ce fait, ces opérateurs prennent la forme de matrice 2×2 à **coefficients complexes**. On peut associer à la *mesure* de grandeurs physiques des opérateurs particuliers appelés **observables** correspondant à des matrices *hermitiennes* à valeurs propres réelles. Ces observables forment une *structure algébrique* particulière donnée par les **relations de commutations** entre ces opérateurs.

3 Évolution dans le temps

Introduction Précédemment nous nous sommes concentré sur l'étude d'un qubit à un *instant donné*. Ce qubit correspond à un **vecteur unitaire** à deux composantes complexes appartenant à un **espace de Hilbert** $\mathcal{H}$. Dans la *notation de Dirac*, ce qubit se note $|\varphi\rangle$ et s'exprime selon

$$|\varphi\rangle = \lambda |0\rangle + \mu |1\rangle \quad \text{avec} \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \quad (3.1)$$

où $\mathcal{B} = \{|0\rangle, |1\rangle\}$ correspond à la base orthogonale de $\mathcal{H}$. Dans cette **notation universelle** pour $\mathcal{B}$, nous avons volontairement ignoré la *grandeur physique* à l'origine de cette base (c'est-à-dire la polarisation pour la base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ que nous avons utilisé par le passé). De cette manière on voit que, quelque soit le support physique utilisé pour « fabriquer » un qubit, le **formalisme reste le même**.

On va maintenant examiner l'**évolution temporelle** d'un qubit tel que (3.1) ce qui permettra de comprendre comment le **manipuler** en théorie. En pratique c'est la notion d'*oscillation de Rabi* qui permet de manipuler expérimentalement un qubit.

3.1 Moment angulaire quantique

Sphère de Bloch Avant de passer à l'**évolution temporelle**, on voudrait donner ici une description un peu plus générale du qubit et de ses **réalisations physiques**. En écrivant (3.1) une base orthonormée $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ de $\mathcal{H}$, et les coefficients λ et μ peuvent être paramétrés, compte tenu de l'arbitraire de phase, par

$$\lambda = e^{-i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \quad \text{et} \quad \mu = e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \quad (3.2)$$

Les deux angles θ et ϕ peuvent être considérés comme des angles *polaires* et *azimutaux*, et ils paramètrent la position d'un point sur la surface d'une sphère de rayon unité, appelée **sphère**

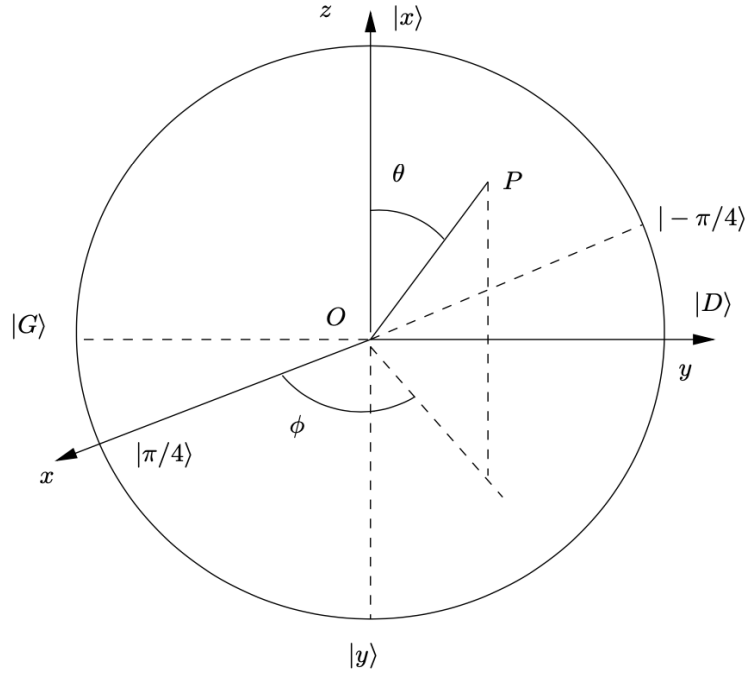


Figure 1: *Sphère de Bloch.* Les points représentés sur la sphère de Bloch correspondent aux bases $\{|x\rangle, |y\rangle\}$, $\{|D\rangle, |G\rangle\}$ et $\{|\theta = \pi/4\rangle, |\theta = -\pi/4\rangle\}$ de la polarisation d'un photon.

de Bloch (ou *sphère de Poincaré* pour le photon), voir **Figure 1**. Si l'on revient à la polarisation d'un photon en identifiant $|0\rangle \rightarrow |x\rangle$ et $|1\rangle \rightarrow |y\rangle$, les états $|x\rangle$ et $|y\rangle$ correspondent aux pôles **nord** et **sud** de la sphère

$$|x\rangle : \theta = 0, \phi \text{ indéterminé} \quad \text{et} \quad |y\rangle : \theta = \pi, \phi \text{ indéterminé} \quad (3.3)$$

tandis que les polarisations circulaires correspondent à des points sur l'équateur

$$|D\rangle : \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = \frac{\pi}{2} \quad \text{et} \quad |G\rangle : \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = -\frac{\pi}{2} \quad (3.4)$$

Notion de spin Une autre réalisation physique importante du qubit est le spin 1/2. Pour introduire le sujet considérons un phénomène simple. Une petite aiguille aimantée constitue ce que les physiciens appellent un *dipôle magnétique*, caractérisé par un *moment dipolaire magnétique*, ou simplement **moment magnétique**, noté $\vec{\mu}$. Placée dans un champ magnétique $\vec{B}$, cette aiguille **s'aligne** dans la direction du champ, ce que fait l'aiguille de toute boussole dans le champ magnétique terrestre. La raison de l'alignement est la suivante : l'énergie E du dipôle magnétique dans le champ $\vec{B}$ est

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (3.5)$$

et la position d'**énergie minimale** est celle où $\vec{\mu}$ est parallèle et de même sens que $\vec{B}$. Lorsque le champ n'est *pas uniforme*, le dipôle se déplace vers la région où le champ est le plus grand en valeur absolue, de façon à **minimiser son énergie**. En résumé, le dipôle est soumis à un couple qui tend à **l'aligner avec le champ**, et à une force qui tend à le faire bouger sous l'influence d'un *gradient* de champ.

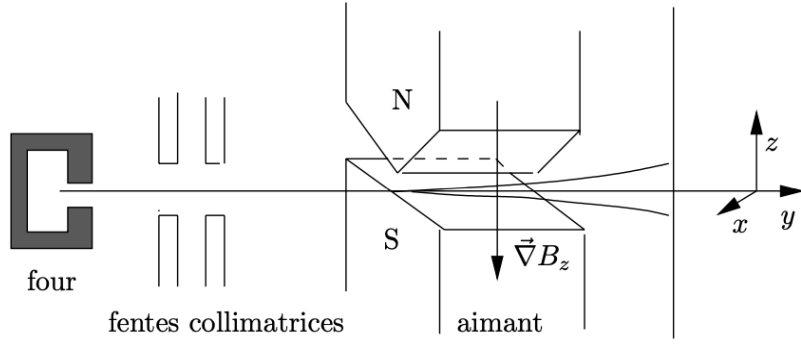


Figure 2: *Expérience de Stern-Gerlach.* Des atomes d'argent sortant du four sont collimatés et passent dans l'entrefer d'un aimant construit de façon que le champ soit inhomogène, avec un gradient parallèle et de sens opposé à Oz . C'est en fait le moment magnétique d'un électron, mille fois plus grand que celui d'un proton, qui est responsable de la déviation.

Expérience de Stern-Gerlach Le **proton** possède un *moment magnétique* qui peut prendre **deux directions**, et *deux seulement*, dans un champ magnétique, ce que l'on met en évidence de la façon suivante : un faisceau de protons⁴ passe dans un champ magnétique **orienté**, suivant une direction $\hat{n}$ perpendiculaire à la direction du faisceau. Le faisceau se scinde alors en deux sous-faisceaux, **l'un** est dévié dans la direction $\hat{n}$, **l'autre** dans la direction opposée $-\hat{n}$. C'est *l'expérience de Stern-Gerlach* (**Figure 2**, avec $\hat{n}$ selon Oz), très **analogue** dans son principe à la séparation d'un rayon de lumière naturelle en deux rayons par un *crystal biréfringent*.

On peut imaginer l'analogie d'une expérience **analyseur/polariseur** avec un spin 1/2 (**Figure 3**). **Toutefois**, on remarque que la situation polariseur/analyseur croisés correspond à $\theta = \pi$ et non à $\theta = \pi/2$ comme dans le cas des photons. On construit une *base de $\mathcal{H}$* en prenant pour **vecteurs de base** les vecteurs $|0\rangle$ et $|1\rangle$, qui correspondent aux *états préparés* par un champ magnétique parallèle à Oz . Suivant (3.1) et (3.2), l'état de spin 1/2 le plus général est

$$|\varphi\rangle = e^{-i\frac{\phi}{2}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\frac{\phi}{2}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \quad (3.6)$$

et on montre que cet état est celui **sélectionné** par un champ magnétique parallèle à $\hat{n}$, avec

$$\hat{n} = \begin{pmatrix} \sin\theta \cos\theta \\ \sin\theta \sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \sin\theta \cos\theta \vec{u}_x + \sin\theta \sin\theta \vec{u}_y + \cos\theta \vec{u}_z \quad (3.7)$$

La **sphère de Bloch** possède dans ce cas une *interprétation géométrique* évidente : le spin 1/2 décrit par le vecteur (3.6) est orienté suivant la direction $\hat{n}$.

Matrices de Pauli Nous avons vu que les propriétés physiques des qubits étaient représentées par des **opérateurs hermitiens**. Une base commode pour ces opérateurs est celle des **matrices de Pauli**

$$\sigma_1 \text{ (ou } \sigma_x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 \text{ (ou } \sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 \text{ (ou } \sigma_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

⁴En fait ceci est une idéalisation : en effet, on doit utiliser des atomes neutres et non des protons, sinon les effets seraient masqués par des forces dues aux charges, et de plus le magnétisme nucléaire est trop faible pour être mis en évidence dans une telle expérience.

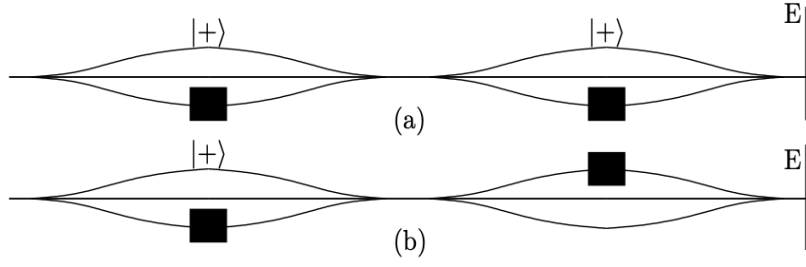


Figure 3: *Polariseurs croisés pour le spin 1/2.* Dans le cas (a), 100 % des spins sont transmis par le second appareil de Stern-Gerlach, et 0% dans le cas (b).

Ces matrices sont *hermitiennes* (et aussi *unitaires*). Pour une matrice hermitienne $\mathcal{M}$ les opérations de *transposition* et de *conjugaison complexe* donne la **matrice inverse** selon

$$\mathcal{M}^{-1} = \mathcal{M}^\dagger \quad (3.9)$$

où $\mathcal{M}^\dagger$ représente le fait de transposer $\mathcal{M}$ et de prendre le conjugué complexe de chaque élément de $\mathcal{M}$. Une matrice hermitienne possède des **valeurs propres réelles**. Toute matrice 2×2 hermitienne $\mathcal{M}$ peut s'écrire comme

$$\mathcal{M} = \lambda_0 \mathcal{I} + \sum_{i=1}^3 \lambda_i \sigma_i \quad (3.10)$$

avec des **coefficients réels** et où $\mathcal{I}$ est la matrice identité. Les *matrices de Pauli* vérifient les propriétés importantes suivantes

$$\sigma_i^2 = \mathcal{I} \quad \sigma_1 \sigma_2 = i \sigma_3 \quad \sigma_2 \sigma_3 = i \sigma_1 \quad \sigma_3 \sigma_1 = i \sigma_2 \quad (3.11)$$

Les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont **vecteurs propres** de σ_z , avec les valeurs propres ± 1 et

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

et on vérifie immédiatement que le vecteur $|\varphi\rangle$ (3.6) est **vecteur propre** de

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{n} = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

avec la **valeur propre** $+1$. En outre, le vecteur $\langle \vec{\sigma} \rangle$ est *valeur moyenne* du spin dans l'état (3.6) et est donné par

$$\langle \vec{\sigma} \rangle = (\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle, \langle \sigma_z \rangle) \quad (3.14)$$

est orienté suivant $\hat{n}$. On a également la propriété (souvent utile) suivante pour deux vecteurs $\vec{a}$ et $\vec{b}$ (de $\mathbb{R}^3$)

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b}) \mathcal{I} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) \quad (3.15)$$

où $\vec{a} \times \vec{b}$ est le **produit vectoriel** de $\vec{a}$ et $\vec{b}$. Nous venons de voir la **réalisation physique** d'un qubit par un spin 1/2, mais il en existe bien d'autres, comme par exemple un *atome à deux niveaux*. Dans tous les cas, on aura un **espace de Hilbert de dimension 2**, et l'état d'un qubit pourra toujours être représenté par un point sur la *sphère de Bloch*.

3.2 Équation d'évolution

Équation de Schrödinger Introduisons *explicitement le temps*, en supposant que (3.1) est valable à $t = 0$, c'est-à-dire on écrit

$$|\varphi(t=0)\rangle = \lambda(t=0)|0\rangle + \mu(t=0)|1\rangle \quad (3.16)$$

Nous allons supposer que la **transformation**

$$|\varphi(0)\rangle \rightarrow |\varphi(t)\rangle \quad (3.17)$$

est **linéaire** et que la norme de $|\varphi\rangle$ reste **égale à l'unité**. Dans ce cas on peut écrire

$$|\varphi(t)\rangle = \lambda(t)|0\rangle + \mu(t)|1\rangle \quad \text{avec} \quad |\lambda(t)|^2 + |\mu(t)|^2 = 1 \quad (3.18)$$

La transformation $|\varphi(0)\rangle \rightarrow |\varphi(t)\rangle$ est donc une **transformation unitaire** que l'on peut représenter par un **opérateur** $U(t, 0)$ (un **opérateur unitaire** U obéit à $U^{-1} = U^*$) agissant selon

$$|\varphi(t)\rangle = U(t, 0)|\varphi(t=0)\rangle \quad (3.19)$$

Dans ce sens on peut écrire de manière générale que

$$|\varphi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\varphi(t_1)\rangle \quad \text{et} \quad U(t_2, t_1) = U^{-1}(t_1, t_2) = U^*(t_1, t_2) \quad (3.20)$$

De plus, U doit obéir à une **propriété de groupe** et satisfait la *propriété de Markov* (caractéristique des *processus stochastiques* ou *aléatoires*)

$$U(t, t_0) = U(t, t')U(t', t_0) \quad (3.21)$$

et enfin $U(t, t) = \mathcal{I}$. En dérivant la relation (3.21) par rapport à t on obtient

$$\frac{d}{dt}U(t, t_0) = \left(\frac{d}{dt}U(t, t')\right)U(t', t_0) \quad (3.22)$$

ce qui conduit définir l'*opérateur hamiltonien* $H(t)$ tel que

$$\lim_{t' \rightarrow t} \frac{d}{dt}U(t, t') = -\frac{i}{\hbar}H(t) \quad (3.23)$$

Le facteur i est présent pour assurer que $H(t)$ soit un opérateur *unitaire*. En effet

$$\frac{d}{dt}\left(U(t, t')U^*(t, t')\right) = \frac{d}{dt}(\mathcal{I}) = 0 = \frac{d}{dt}\left(U(t, t')\right)U^*(t, t') + U(t, t')\frac{d}{dt}\left(U^*(t, t')\right) \quad (3.24)$$

Si on prend $t' \rightarrow t$ on a alors

$$0 = -\frac{i}{\hbar}\left(H(t) - H^*(t)\right) \quad \text{soit} \quad H(t) = H^*(t) \quad (3.25)$$

De plus $H(t)$ possède des *valeurs propres réelles* et est *symétrique*, c'est donc un **opérateur hermitien**. En injectant la définition (3.23) dans (3.22) on obtient alors l'*équation de Schrödinger* pour l'**opérateur évolution** $U(t, t_0)$

$$i\hbar \frac{d}{dt}U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad (3.26)$$

Comme $H(t)$ est un opérateur hermitien, il représente une **propriété physique**, et de fait H n'est autre que l'*opérateur énergie* du système. Dans le cas fréquent où la physique est *invariante par translation de temps*, l'opérateur $U(t_2, t_1)$ ne dépend que de la différence $(t_2 - t_1)$ et H est indépendant du temps.

Exemple d'application Prenons le cas d'une **particule de spin 1/2** plongée dans un *champ magnétique intense* $\vec{B}_0$ ($B_0 \simeq$ quelques Teslas, 1 Tesla = 10^4 gauss, environ 10^4 fois le champ magnétique terrestre) indépendant du temps. Le hamiltonien est alors **indépendant du temps**, et comme il est hermitien, il est **diagonalisable** dans une certaine base de sorte que on peut l'écrire sous la forme

$$H = \begin{pmatrix} \hbar\omega_A & 0 \\ 0 & \hbar\omega_B \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

où $\hbar\omega_A$ et $\hbar\omega_B$ sont les *niveaux d'énergie* du spin de la particule de spin 1/2. Si le champ magnétique est **parallèle à Oz**, les vecteurs propres de H ne sont autres que les vecteurs de base $|0\rangle$ et $|1\rangle$ (voir annexe A). Comme H est **indépendant du temps**, l'équation d'évolution

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = HU \quad (3.28)$$

s'intègre immédiatement pour donner

$$U(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0) \right] \quad (3.29)$$

soit, dans la base où H est **diagonal**,

$$U(t, t_0) = \begin{pmatrix} e^{i\omega_A(t-t_0)} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_B(t-t_0)} \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

Si $|\varphi(t=0)\rangle$ est donné par

$$|\varphi(t=0)\rangle = \lambda|0\rangle + \mu|1\rangle \quad (3.31)$$

alors le **vecteur d'état** $|\varphi(t)\rangle$ au temps t est

$$|\varphi(t=0)\rangle = e^{-i\omega_A t} \lambda |0\rangle + e^{-i\omega_B t} \mu |1\rangle \quad (3.32)$$

soit

$$\lambda(t) = e^{-i\omega_A t} \lambda \quad \text{et} \quad \mu(t) = e^{-i\omega_B t} \mu \quad (3.33)$$

L'évolution temporelle est *déterministe* et elle garde la trace des **conditions initiales** λ et μ . En raison de l'**arbitraire de phase**, en réalité, la seule quantité *physiquement pertinente* dans l'évolution est la différence

$$\omega_0 = \omega_B - \omega_A \quad (3.34)$$

On pourrait aussi bien écrire $\vec{\mu}$ sous la forme

$$H = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_0 \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

La quantité ω_0 joue un rôle capital et elle est appelée *énergie* (ou *fréquence*) *de résonance*. En résolvant les **équations du mouvement** d'un spin, on montre que celui-ci précesse autour de $\vec{B}_0$, avec une vitesse angulaire ω_0 , la *fréquence de Larmor*.

Atome à deux niveaux En prenant en compte les résultats précédents on peut discuter brièvement d'une **autre réalisation physique d'un qubit**, l'*atome à deux niveaux*. Un atome possède un **grand nombre de niveaux d'énergie**, mais si l'on s'intéresse à l'action d'un *laser* sur cet atome, il est souvent possible de se **restreindre à deux niveaux particuliers**, en général le niveau fondamental ω_A et un niveau excité ω_B , $\omega_B - \omega_A$; c'est le modèle de l'*atome à deux niveaux*, très utilisé en physique atomique. Si l'atome est porté dans son **état excité**, il revient spontanément dans son **état fondamental** en émettant un *photon* de fréquence $\omega_0 = \omega_B - \omega_A$. Si l'on envoie sur l'atome dans son état fondamental un faisceau laser de fréquence $\omega \simeq \omega_0$, on observera un **phénomène de résonance** : l'absorption de la lumière laser sera d'*autant plus importante* que ω sera proche de ω_0 , phénomène tout à fait analogue à celui décrit dans la section suivante dans le cas du spin 1/2.

3.3 Oscillations de Rabi

Probabilité de transition Soit un spin 1/2 comme dans l'annexe A soumis à un **champ magnétique classique** avec une composante périodique

$$\vec{B} = B_0 \hat{z} + B_1 (\hat{x} \cos(\omega t) - \hat{y} \sin(\omega t)) \quad (3.36)$$

Dans ce cas la forme de $H(t)$ (voir annexe A) est alors

$$H(t) = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{i\omega t} \\ \omega_1 e^{-i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

où ω_1 est proportionnel à B_1 , et donc **ajustable**. La fréquence ω_1 est appelée *fréquence de Rabi*. Il reste à **résoudre l'équation d'évolution** (3.26). Celle-ci se transforme aisément en un **système de deux équations différentielles** du premier ordre couplées pour $\lambda(t)$ et $\mu(t)$, et la résolution de ce système ne pose pas trop de difficulté (voir annexe B). Le résultat peut être exprimé sous la forme suivante : si le **qubit est au temps $t = 0$** dans l'état $|0\rangle$, il aura au temps t une **probabilité $P_{0 \rightarrow 1}(t)$** de se trouver dans l'état $|1\rangle$ donnée par

$$P_{0 \rightarrow 1}(t) = \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \quad \text{avec} \quad \Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \quad (3.38)$$

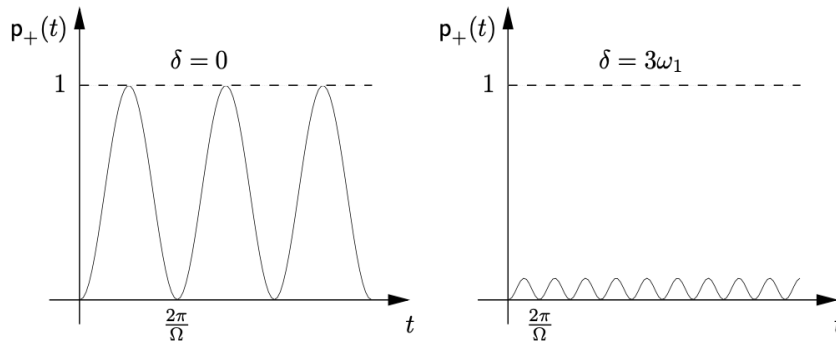


Figure 4: Oscillations de Rabi. Le désaccord $\delta = \omega - \omega_0$ et $p_+(t) = P_{0 \rightarrow 1}(t)$

Oscillations de Rabi Le **phénomène d'oscillation** entre les niveaux $|0\rangle$ et $|1\rangle$, appelée *oscillations de Rabi*, prend son **amplitude maximale** pour $\omega = \omega_0$, c'est-à-dire à la résonance

$$P_{0 \rightarrow 1}(t) = \sin^2 \left(\frac{\omega_1 t}{2} \right) \quad (3.39)$$

Pour passer de l'état $|0\rangle$ à l'état $|1\rangle$, il suffit d'ajuster le temps t d'application du *champ tournant*

$$\frac{\omega_1 t}{2} = \frac{\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad t = \frac{\pi}{\omega_1} \quad (3.40)$$

C'est ce que l'on appelle une *impulsion* π . Si l'on choisit un temps intermédiaire entre 0 et $\frac{\pi}{\omega_1}$, on obtiendra une *superposition de $|0\rangle$ et de $|1\rangle$* , en particulier si $\frac{\pi}{2\omega_1}$, ou *impulsion* $\frac{\pi}{2}$, on obtient la superposition suivante

$$|0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \quad (3.41)$$

Cette opération sera d'une *importance cruciale* pour le *calcul quantique*. Les équations sont essentiellement identiques dans le cas d'un *atome à deux niveaux* dans un champ laser (de fréquence ω), une fois faite une approximation en général bien vérifiée, « *l'approximation des ondes tournantes* ». La *fréquence de Rabi* ω_1 est proportionnelle au produit (scalaire) du *moment dipolaire électrique* (de transition) de l'atome $\vec{d}$ par le *champ électrique* $\vec{E}$ de l'onde laser, c'est-à-dire $\omega_1 \propto \vec{d} \cdot \vec{E}$.

Résumé Dans cette section nous avons décrit l'évolution dans le temps d'un vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ par le biais d'un *opérateur d'évolution* unitaire U . Cette opérateur est instrumental afin de démontrer l'équation fondamentale de la physique quantique, *l'équation de Schrödinger*. Cette équation est ensuite utilisée afin d'étudier la *manipulation d'un qubit* sous la forme du *spin 1/2* d'un proton soumis à un champ magnétique. Dans ce sens, le phénomène d'*oscillation de Rabi* a permis de mettre en évidence la *transformation* d'un état initial $|0\rangle$ en la *superposition d'états* $1/\sqrt{2} (|0\rangle + |1\rangle)$, ce qui sera plus exploité en *calcul quantique*.

A Interaction d'un spin 1/2 avec un champ magnétique

On peut montrer que le **moment magnétique** $\vec{\mu}$ d'un système chargé en rotation est **proportionnel** à son *moment angulaire* (ou *cinétique*) $\vec{J}$, c'est-à-dire que

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{J} \quad (\text{A.1})$$

où γ est appelé **facteur gyromagnétique**. Le spin du proton est en fait un *moment angulaire propre*, un peu comme si le proton tournait sur lui même comme une toupie. Cependant cette **image classique** du spin du proton est à prendre avec précaution, elle peut se révéler totalement fausse dans l'interprétation de certains phénomènes : seule une **description quantique** permet de vraiment comprendre le spin. Le moment angulaire propre est une *propriété physique vectorielle*, auquel doit correspondre un **opérateur hermitien** (en fait trois opérateurs hermitiens, un par composante spatiale). Le *spin du proton* est l'opérateur $\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$. Le *moment magnétique*, propriété physique vectorielle, est aussi un opérateur, et il doit exister une **relation de proportionnalité** entre le moment angulaire propre et le moment magnétique, car un seul vecteur (en fait un pseudo-vecteur) est à notre disposition. On a alors

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2} \gamma_p \vec{\sigma} \quad \text{avec} \quad \gamma_p = 5.59 \frac{q_p}{2m_p} \quad (\text{A.2})$$

où γ_p est le **facteur gyromagnétique** du proton, q_p sa charge et m_p sa masse. La valeur numérique de γ_p , est **déduite de l'expérience**, il n'existe pour le moment aucun calcul théorique fiable de γ_p .

Pour les besoins du calcul quantique, il est nécessaire de pouvoir **transformer** par exemple un état $|0\rangle$ du qubit en une **superposition linéaire** de $|0\rangle$ et de $|1\rangle$. Pour ce faire, en prenant comme exemple le spin 1/2, la solution est d'**appliquer au spin un champ magnétique constant** $\vec{B}_0$ parallèle à Oz , et un **champ magnétique** $\vec{B}(t)$ **tournant** dans le plan xOy à une vitesse angulaire ω

$$\vec{B}_1(t) = B_1 \left(\hat{x} \cos(\omega t) - \hat{y} \sin(\omega t) \right) \quad (\text{A.3})$$

Le *hamiltonien* du moment magnétique du proton dans un champ magnétique s'écrit par analogie avec (3.5), puisque H est l'opérateur énergie, soit

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{1}{2} \gamma_p \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \quad (\text{A.4})$$

Le champ magnétique utilisé est

$$\vec{B} = B_0 \hat{z} + B_1 \left(\hat{x} \cos(\omega t) - \hat{y} \sin(\omega t) \right) \quad (\text{A.5})$$

On pose $\omega_0 = \gamma_p B_0$ et $\omega_1 = \gamma_p B_1$, d'où le hamiltonien

$$\begin{aligned} H(t) &= -\frac{1}{2} \gamma_p B_0 \sigma_z - \frac{1}{2} \gamma_p B_1 \left(\sigma_x \cos(\omega t) - \sigma_y \sin(\omega t) \right) \\ &= -\frac{1}{2} \omega_0 \sigma_z - \frac{1}{2} \omega_1 \left(\sigma_x \cos(\omega t) - \sigma_y \sin(\omega t) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

et (3.37) en utilisant la forme explicite (3.8) des matrices de Pauli.

B Solution de l'équation d'évolution

L'équation (3.37) se **transforme immédiatement** en equation pour $|\varphi(t)\rangle = U(t)|\varphi(t=0)\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = H(t) |\varphi(t)\rangle \quad (\text{B.1})$$

Cette équation est **l'équation de Schrödinger pour l'état $|\varphi(t)\rangle$** . On peut en déduire que $\lambda(t)$ et $\mu(t)$ obéissent au *système d'équations différentielles couplées*

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \lambda(t) &= -\frac{\omega_0}{2} \lambda(t) - \frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} \mu(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} \mu(t) &= -\frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} \lambda(t) + \frac{\omega_0}{2} \mu(t) \end{aligned}$$

Il est commode de définir les fonctions $\hat{\lambda}(t)$ et $\hat{\mu}(t)$ telles que

$$\lambda(t) = \hat{\lambda}(t) e^{i\frac{\omega_0}{2}t} \quad \text{et} \quad \mu(t) = \hat{\mu}(t) e^{-i\frac{\omega_0}{2}t} \quad (\text{B.2})$$

Le système d'équations différentielles **se simplifie** alors pour donner

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\lambda}(t) = -\frac{\omega_1}{2} e^{i\frac{\omega-\omega_0}{2}t} \hat{\mu}(t) \quad (\text{B.3})$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\mu}(t) = -\frac{\omega_1}{2} e^{i\frac{\omega-\omega_0}{2}t} \hat{\lambda}(t) \quad (\text{B.4})$$

Ce système se transforme aisément en **une équation différentielle du second ordre** pour $\hat{\lambda}(t)$ (et $\hat{\mu}(t)$). On se contente ici d'examiner le cas de la résonance $\omega = \omega_0$ (voir l'exercice C.2), où

$$\frac{d^2}{dt^2} \hat{\lambda}(t) = -\frac{\omega_1^2}{4} \hat{\lambda}(t) \quad (\text{B.5})$$

La **solution du système** est alors

$$\hat{\lambda}(t) = a \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) + b \sin\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \quad (\text{B.6})$$

$$\hat{\mu}(t) = ia \sin\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) - ib \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \quad (\text{B.7})$$

Les coefficients a et b dépendent des **conditions initiales**. Partant par exemple de l'état $I0\rangle$ au temps $t = 0$

$$\lambda(t=0) = 1, \quad \mu(t=0) = 0 \quad \text{ou} \quad a = 1, \quad b = 0 \quad (\text{B.8})$$

on trouve au temps $t = \frac{\pi}{2\omega_1}$ (impulsion $\frac{\pi}{2}$), un état qui est une **superposition linéaire** de $I0\rangle$ et de $I1\rangle$

$$|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\frac{\omega_0}{2}t} |0\rangle + i e^{-i\frac{\omega_0}{2}t} |1\rangle \right) \quad (\text{B.9})$$

Les **facteurs de phase** peuvent être absorbés dans une redéfinition des états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ de façon à obtenir (3.41).

C Exercices

C.1 Opérateur de rotation pour le spin 1/2

1. Montrer que la valeur moyenne de $\langle \vec{\sigma} \rangle$ de l'opérateur dans l'état (3.6) est donnée par $\langle \vec{\sigma} \rangle = \hat{n}$ où $\hat{n}$ est défini par (3.7).

2. Montrer que

$$\exp\left(-i\frac{\theta}{2}(\vec{\sigma} \cdot \hat{p})\right) = I \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i(\vec{\sigma} \cdot \hat{p}) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{C.1})$$

où $\hat{p}$ est un vecteur unitaire.

Rappel : $e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$.

Suggestion : Calculer $(\vec{\sigma} \cdot \hat{p})^2$. L'opérateur $\exp[-i\theta(\vec{\sigma} \cdot \hat{p})/2]$ est l'opérateur unitaire de rotation $\mathcal{R}_{\hat{p}}(\theta)$ d'un angle θ autour de l'axe $\hat{p}$. Pour le voir, utiliser comme axe de rotation le vecteur $\hat{p} = (-\sin \phi, \cos \phi, 0)$ et montrer qu'une rotation d'angle θ autour de cet axe amène l'axe Oz sur le vecteur $\hat{n}$ (3.7). Montrer que $\exp[-i\theta(\vec{\sigma} \cdot \hat{p})/2]|0\rangle$ est bien le vecteur $|\varphi\rangle$ (3.6), vecteur propre de $\vec{\sigma} \cdot \hat{n}$ avec la valeur propre $+1$, à un facteur de phase près. Que vaut $\exp[-i\theta(\vec{\sigma} \cdot \hat{p})/2]|1\rangle$?

3. Lorsque $\phi = -\pi/2$, la rotation s'effectue autour de Ox . Donner la forme matricielle explicite de $\mathcal{R}_x(\theta)$. Comparant avec (B.6) et (B.7), montrer que, sous l'action de $\vec{B}_1(t)$, le vecteur d'état tourne d'un angle $\theta = -\omega_1 t$ si ce champ est appliqué pendant l'intervalle de temps $[0, t]$.

C.2 Oscillation de Rabi hors résonance

1. Dans le cas non résonant, montrer que l'on obtient à partir de (B.3) et (B.4) l'équation différentielle du second ordre pour $\hat{\lambda}(t)$

$$\frac{2}{\omega} \frac{d^2 \hat{\lambda}}{dt^2} - \frac{2i}{\omega_1} \delta \frac{d\hat{\lambda}}{dt} + \frac{1}{2} \omega_1 \hat{\lambda} = 0 \quad \text{avec} \quad \delta = \omega - \omega_0 \quad (\text{C.2})$$

dont on cherche des solutions de la forme

$$\hat{\lambda}(t) = e^{i\Omega_{\pm} t} \quad (\text{C.3})$$

Montrer que les valeurs de $\Omega_{\pm}$ sont les racines d'une équation du second degré qui sont données en fonction de la fréquence $\Omega = (\omega_1^2 + \delta^2)^{1/2}$ par

$$\Omega_{\pm} = \frac{1}{2}(\delta \pm \Omega) \quad (\text{C.4})$$

2. La solution de (C.2) pour $\hat{\lambda}$ est une combinaison linéaire de $\exp(i\Omega_+ t)$ et $\exp(i\Omega_- t)$

$$\hat{\lambda}(t) = a e^{i\Omega_+ t} + b e^{i\Omega_- t} \quad (\text{C.5})$$

Choisissons les conditions initiales $\hat{\lambda}(0) = 1$ et $\hat{\mu}(0) = 0$. Comme $\hat{\mu}(0) \propto \frac{d\hat{\lambda}}{dt}(0)$, en déduire a et b en fonction de Ω et $\Omega_{\pm}$.

3. Montrer que le résultat final se met sous la forme

$$\hat{\lambda}(t) = \frac{e^{i\frac{\delta}{2}t}}{\Omega} \left[\Omega \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\delta \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] \quad \text{et} \quad \hat{\mu}(t) = \frac{i\omega_1}{\Omega} e^{-i\frac{\delta}{2}t} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (\text{C.6})$$

qui se réduit bien à (B.6) et (B.7) lorsque $\delta = 0$. Si l'on part à $t = 0$ de l'état $|0\rangle$, quelle est la probabilité de trouver un spin dans l'état $|1\rangle$ au temps t ? Montrer que la probabilité maximale $P_{\max}$ de transfert de l'état $|0\rangle$ vers l'état $|1\rangle$ pour $\frac{\Omega t}{2} = \frac{\pi}{2}$ est donnée par une *courbe de résonance* de largeur δ

$$P_{\max} = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + \delta^2} = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega - \omega_0)^2} \quad (\text{C.7})$$

Tracer la courbe donnant $P_{\max}$ en fonction de ω . Comme le montre la **Figure 4**, les oscillations de Rabi sont maximales à la résonance, et elles diminuent rapidement d'amplitude quand δ croît.