

7.

L'équation pilote sous forme de Lindblad. Description des sauts quantiques

Discussion des conditions d'existence de l'équation pilote.
L'approximation de Markov et son interprétation physique.

La forme de Lindblad de l'équation pilote déduite de la forme de Kraus des super-opérateurs de transformations quantiques.

L'évolution infinitésimale décrite par l'équation pilote vue comme une mesure généralisée non lue.

Les opérateurs de Lindblad et leur interprétation en terme de sauts quantiques.

Du super-opérateur d'évolution à l'équation pilote

L'évolution sur un intervalle de temps τ de l'opérateur densité d'un système ouvert est décrite par un super-opérateur \mathcal{E}_τ propageant l'état initial $\rho_A(0)$ jusqu'à l'état final $\rho_A(\tau)$. L'action de \mathcal{E}_τ s'exprime sous forme d'une somme finie de termes impliquant des produits de $\rho_A(0)$ avec des opérateurs $M_\mu(\tau)$ et $M_\mu^+(\tau)$ agissant sur le système (équ.5.4). Cette description généralise à un système ouvert couplé à un environnement quelconque celle donnée pour un système fermé par (5-1). Alors que l'évolution des systèmes fermés est unitaire et réversible, celle des systèmes ouverts est non unitaire et irréversible.

Nous nous proposons maintenant de décrire l'évolution du système ouvert A non plus sous forme globale, entre instants initial et final, mais sous forme d'une équation différentielle pilote reliant la dérivée de l'opérateur densité à sa valeur au même instant. Cette équation généralise pour les systèmes ouverts l'équation de Schrödinger d'un système isolé. L'existence d'une telle équation impose que le couplage du système à son environnement satisfasse la condition de Markov dont nous préciserons la signification. Nous montrerons que l'existence d'une forme de Kraus pour le super-opérateur d'évolution infinitésimal du système conduit à une forme générale d'équation pilote, dite de Lindblad, dont l'interprétation physique en termes de sauts quantiques sera ensuite discutée.

Equation pilote et probabilités par unité de temps

Commençons par un argument heuristique simple, en revenant sur les transformations d'un qubit décrites à la leçon 3. Les expressions donnant les super-opérateurs d'évolution du qubit entre 0 et τ sont exprimées à partir de la probabilité p pour qu'un certain type d'événement (basculement de bit ou de phase, émission spontanée...) se produise entre ces instants. Pour pouvoir décrire cette évolution par une équation pilote, il faut que p soit, sur un intervalle de temps court, proportionnel à τ , c'est à dire que l'on puisse définir une probabilité de processus par unité de temps. Montrons le dans le cas du basculement de phase. L'évolution sur un temps court de ρ_A est décrit par un super-opérateur \mathfrak{L}_τ qui dépend de la loi de probabilité $p(\tau)$. La définition d'un taux de variation de ρ_A s'obtient par passage à la limite $\tau \rightarrow 0$:

$$\mathfrak{L}_\tau(\rho_A) = (1 - p(\tau))\rho_A + p(\tau)Z\rho_A Z \rightarrow \frac{d\rho_A}{dt} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\mathfrak{L}_\tau(\rho_A) - \rho_A}{\tau} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{p(\tau)}{\tau} [Z\rho_A Z - \rho_A] \quad (7-1)$$

Si $p(\tau) = \gamma \tau/2$, on obtient bien une équation pilote reliant $d\rho_A(t)/dt$ à $\rho_A(t)$:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -\frac{\gamma}{2} [\rho_A - Z\rho_A Z] \quad (7-2)$$

Probabilités de processus par unité de temps et loi exponentielle

L'existence d'une équation pilote, liée à celle d'une probabilité par unité de temps du processus associé, conduit à une loi exponentielle pour l'évolution de

A:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -\gamma \begin{pmatrix} 0 & \rho_{A01} \\ \rho_{A10} & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \rho_A(t) = \begin{pmatrix} \rho_{A00}(0) & e^{-\gamma t} \rho_{A01}(0) \\ e^{-\gamma t} \rho_{A10}(0) & \rho_{A11}(0) \end{pmatrix} \quad (7-3)$$

On peut d'ailleurs retrouver ce résultat en appliquant n fois l'opérateur infinitésimal \mathfrak{L}_τ :

$$\mathfrak{L}_{(n\tau)}(\rho) = \begin{pmatrix} \rho_{00} & (1-\gamma\tau)^n \rho_{01} \\ (1-\gamma\tau)^n \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix} \quad (7-4)$$

ce qui en passant à la limite $n = t/\tau \rightarrow \infty$ redonne bien (7-3).

Ce raisonnement peut être repris pour les autres super-opérateurs d'évolution d'un qubit. Le passage à une équation pilote implique la définition de probabilités par unité de temps, dont l'existence n'est pas évidente. En mécanique quantique, on s'attend à ce que les amplitudes de transition, aux temps courts, soient proportionnelles au temps, ce qui conduit a priori à des probabilités proportionnelles au carré du temps. Que l'on puisse définir des probabilités par unité de temps résulte d'hypothèses générales sur l'environnement et son couplage au système que nous discutons maintenant.

Conditions d'existence d'une équation pilote

Nous cherchons une équation donnant la vitesse de variation de ρ_A en fonction de ρ_A , qui ne doit pas dépendre de l'état de A aux instants antérieurs:

$$\frac{d\rho_A(t)}{dt} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\rho_A(t + \tau) - \rho_A(t)}{\tau} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\mathcal{L}_{t,\tau}(\rho_A(t)) - \rho_A(t)}{\tau} \quad (7-5)$$

où $\mathcal{L}_{t,\tau}$ est un super-opérateur dépendant *a priori* de t et de τ . Pour déterminer l'évolution de A couplé à E, nous devons étudier celle de l'opérateur densité global $\rho_{AE}(t)$ dont ρ_A est la trace partielle par rapport à E:

$$\rho_{AE}(t) = \rho_A(t)\rho_E(t) + \delta\rho_{AE}(t) \quad (7-6a)$$

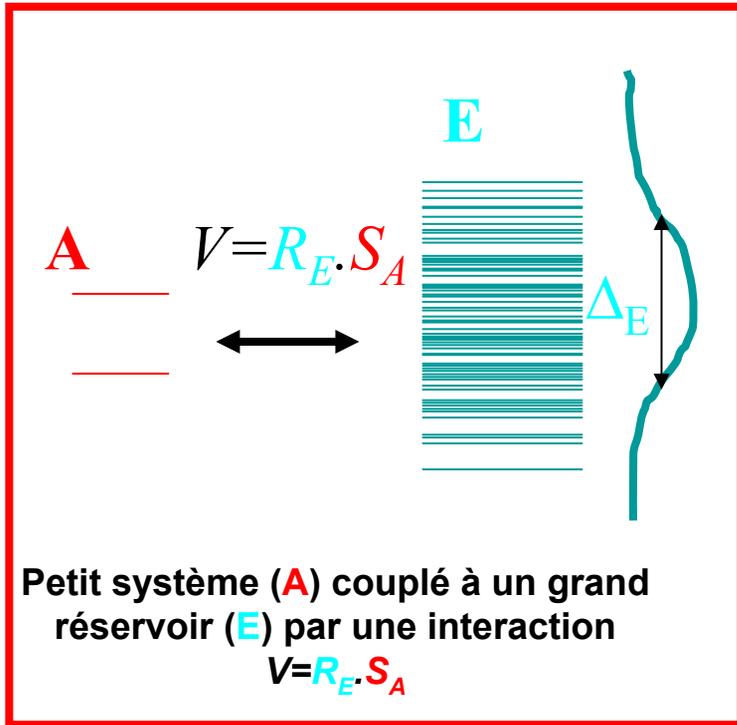
$$\rho_A(t) = Tr_E\{\rho_{AE}(t)\} \quad ; \quad \rho_E(t) = Tr_A\{\rho_{AE}(t)\} \quad (7-6b)$$

L'opérateur $\delta\rho_{AE}(t)$, de trace nulle, décrit les corrélations entre les 2 systèmes induites par leur couplage. Pour que (7-5) conduise à une équation pilote, il faut que:

$$\frac{|\delta\rho_{AE}(t)|}{|\rho_{AE}(t)|} \ll 1 \quad (7-7a) \quad ; \quad \rho_E(t) \approx \overline{\rho_E} \quad (7-7b)$$

L'inégalité (7-7a) exprime que les corrélations entre A et E sont négligeables. C'est nécessaire pour qu'un super-opérateur propageant ρ_A entre t et $t+\tau$ existe (voir leçon 3). L'eq (7-7b) indique que l'état de E est stationnaire, ce qui rend $\mathcal{L}_{t,\tau}$ indépendant de t et signifie que l'état de E ne dépend pas de A aux instants antérieurs (réaction négligeable de A sur E).

Temps de corrélation de E et condition de Markov



En général, E est un «grand» système insensible à la réaction de A sur lui. E possède un très grand nombre d'états dont les énergies couvrent un spectre de largeur $\hbar \Delta_E$. L'inverse de cette largeur est proportionnel au temps de corrélation $\tau_c = 1/\Delta_E$ de l'environnement. Ce temps décrit la «mémoire» de E, le temps sur lequel survivent les corrélations temporelles $\langle R_E(t) R_E(t+\tau) \rangle_E$ de l'observable R_E de E intervenant dans le couplage entre A et E.

Pendant τ_c , les phases quantiques de la fonction d'onde de A+E évoluent d'une quantité de l'ordre de $|V| \tau_c / \hbar$ où $|V|$ représente un élément de matrice caractéristique du couplage entre A et E. Il faut que ce déphasage soit très petit pour que les conditions (7-7a) et (7-7b) soient satisfaites. On montre en effet:

$$\delta \rho_{AE}(t) = O(|V|^2 \tau_c^2 / \hbar^2) \quad (7-8a) \quad ; \quad \rho_E(t) = \overline{\rho_E} + O(|V|^2 \tau_c^2 / \hbar^2) \quad (7-8b)$$

et l'inégalité:

$$\frac{|V| \cdot \tau_c}{\hbar} \ll 1 \quad (7-9)$$

est la condition de Markov (condition de mémoire courte de l'environnement).

Condition de Markov: séparation de deux échelles de temps

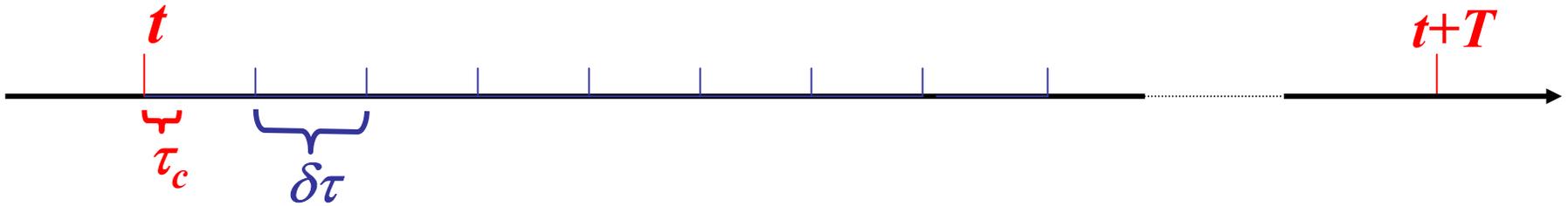
Lorsque la condition de Markov est satisfaite, on distingue dans la description du système deux temps caractéristiques très différents: le temps de corrélation τ_c (échelle de temps courte) et le temps d'évolution typique du système T (échelle de temps longue). L'existence de ces 2 échelles peut se justifier par un argument heuristique. On analyse l'évolution des phases quantiques de A+E comme une suite d'accumulations cohérentes de phase sur des intervalles τ_c , la mémoire de cette phase se perdant au bout de ce temps. L'accumulation de phase sur un temps $t \gg \tau_c$ apparaît comme une marche aléatoire, les phases sur des intervalles successifs s'accumulant en valeur quadratique:

$$\Delta^2 \Phi(t \gg \tau_c) \propto \frac{|V|^2 \tau_c^2}{\hbar^2} \cdot \frac{t}{\tau_c} = \frac{t}{T} \quad (7-10) \quad \text{avec} \quad T = \frac{\hbar^2}{|V|^2 \tau_c^2} \cdot \tau_c \quad (7-11)$$

Le temps caractéristique de l'évolution de la phase et donc de l'état du système, T , est ainsi très long devant le temps de corrélation τ_c , lorsque l'approximation de Markov est valable. Les relations (7-8) s'écrivent alors:

$$\delta \rho_{AE}(t) = O(\tau_c / T) \quad (7-12a) \quad ; \quad \rho_E(t) = \overline{\rho_E} + O(\tau_c / T) \quad (7-12b)$$

Discrétisation du temps («coarse graining»)



Le passage à la limite $\tau \rightarrow 0$ dans (7-5) requiert un peu de soin. On fait tendre τ jusqu'à une valeur $\delta\tau$ intermédiaire entre τ_c et T , telle que le changement relatif de ρ_A sur $\delta\tau$, tout en étant petit devant 1, est grand devant τ_c/T . Il est alors légitime de négliger $\delta\rho_{AE}(t)$ et de considérer que $\mathcal{L}_{\delta\tau,t}$ est indépendant de t . Ceci revient à discrétiser le temps en pas $\delta\tau$ tels que:

$$\tau_c \ll \delta\tau \ll T \quad (7-13)$$

ce qui est possible si la condition de Markov (7-9) est satisfaite. On s'interdit alors d'analyser l'évolution de A sur des temps très courts. De façon plus précise, en exprimant $\rho_{AE}(t)$ à l'aide de (7-6a), on écrit l'évolution de ρ_A entre t et $t+\tau$ ($\tau \gg \tau_c$) comme:

$$\begin{aligned} \rho_A(t+\tau) &= \text{Tr}_E \left\{ U_{AE}(t+\tau,t) \rho_{AE}(t) U_{AE}^+(t+\tau,t) \right\} = \\ &= \text{Tr}_E \left\{ U_{AE}(t+\tau,t) \rho_A(t) |0\rangle_{EE} \langle 0| U_{AE}^+(t+\tau,t) \right\} + \text{Tr}_E \left\{ U_{AE}(t+\tau,t) \delta\rho_{AE}(t) U_{AE}^+(t+\tau,t) \right\} = \\ &= \rho_A(t) + \text{terme d'ordre } \tau/T \quad \text{terme d'ordre } \tau_c/T \text{ (négligeable si } \tau_c \ll \tau \text{)} \end{aligned}$$

Discrétisation du temps (suite)

Le 1er terme à la 2ème ligne de (7-14) diffère de $\rho_A(t)$ d'une quantité en τ/T , alors que le second, proportionnel à la corrélation $\delta\rho_{AE}(t)$, est en τ_c/T , négligeable si $\tau_c \ll \tau$. Notons que nous pouvons toujours remplacer dans (7-6a) ρ_E par un projecteur sur un état pur $|0\rangle_E$ (purification décrite à la leçon 2).

Avec cette approximation, tout se passe comme si, à chaque instant, A était mis en contact avec un environnement non corrélé, dans des conditions identiques à celles décrites à la leçon 3:

$$\rho_A(t + \tau) \approx \text{Tr}_E \left\{ U_{AE}(t + \tau, t) \rho_A(t) |0\rangle_E \langle 0| U_{AE}^\dagger(t + \tau, t) \right\} = \mathcal{L}_\tau(\rho_A(t)) \quad (7-15)$$

L'expression de $\rho_A(t + \tau)$ se déduit de celle de $\rho_A(t)$ par action d'un super-opérateur \mathcal{L}_τ qui ne dépend que de τ et non de t . Faisant tendre τ vers $\delta\tau$ compris entre τ_c et T (eq.7-13), nous obtenons le taux de variation de $\rho_A(t)$:

$$\frac{d\rho_A(t)}{dt} = \lim_{\tau \rightarrow \delta\tau} \frac{\mathcal{L}_\tau(\rho_A(t)) - \rho_A(t)}{\tau} \quad (7-16)$$

Nous avons justifié cette approximation par des arguments qualitatifs. Une analyse précise nécessite une approche plus quantitative pour démontrer (7-8a) et (7-8b). Notons simplement pour conclure que l'existence de l'équation pilote - et l'irréversibilité qui en découle - sont des conséquences de l'approximation de Markov, donc de la « grande taille » de E.

Du super-opérateur sous forme de Kraus à l'équation pilote sous forme de Lindblad

Le super-opérateur \mathcal{E}_τ peut se mettre sous la forme de Kraus:

$$\mathcal{E}_\tau(\rho_A) = \sum_{\mu} M_{\mu}(\tau) \rho_A M_{\mu}^+(\tau) \quad (7-17)$$

Pour $\tau \ll T$, il décrit une évolution infinitésimale et l'on a donc:

$$\mathcal{E}_\tau(\rho_A(t)) = \rho_A(t + \tau) = \rho_A(t) + O(\tau) \quad (7-18)$$

On en déduit que l'un des M_{μ} (noté M_0) admet un développement de la forme:

$$M_0(\tau) = I_A - iA\tau + O(\tau^2) \quad (7-19)$$

où A est un opérateur dont on peut séparer les parties hermitiques et anti-hermitiques (H et J sont hermitiques):

$$A = \frac{H}{\hbar} - iJ \quad (7-20) \quad \text{avec} \quad H = \hbar \frac{A + A^+}{2} \quad (7-21a); \quad J = i \frac{A - A^+}{2} \quad (7-21b)$$

On déduit alors de (7-19), (7-20) et (7-21a,b):

$$M_0(\tau) \rho_A M_0^+(\tau) = \rho_A - \frac{i\tau}{\hbar} [H, \rho_A] - \tau (J \rho_A + \rho_A J) + O(\tau^2) \quad (7-22)$$

Forme de Lindblad de l'équation pilote (suite)

On déduit de (7-17) et (7-22) que l'équation pilote présente une 1ère contribution:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho_A] - (J\rho_A + \rho_A J) + \dots \quad (7-23)$$

Le 1er terme dans le membre de droite de (7-23) décrit une évolution hamiltonienne, d'où la notation H donnée au terme correspondant de M_0 . On notera que H resomme le hamiltonien propre du système A et des termes correctifs décrivant les déplacements de niveaux de A induits par le couplage avec l'environnement (termes de Lamb-shifts ou de light-shifts par exemple):

$$H = H_A + \Delta H \quad (7-24)$$

ΔH dépend de E et de son couplage avec A. Nous ne l'explicitons pas et considérons globalement le Hamiltonien renormalisé H de A.

La contribution de M_0 à la relation de fermeture des opérateurs de Kraus s'écrit:

$$M_0^+(\tau)M_0(\tau) = (I_A + iA^+\tau)(I_A - iA\tau) = I_A + i(A^+ - A)\tau + O(\tau^2) = I_A - 2J\tau + O(\tau^2) \quad (7-25)$$

Le terme J joue un rôle important pour assurer la conservation de la trace de ρ_A , donc celle de la probabilité. Nous le retrouverons plus loin.

Forme de Lindblad de l'équation pilote (suite)

Les autres termes ($\mu > 0$) de (7-17) doivent être d'ordre $O(\tau)$:

$$M_{\mu>0}(\tau)\rho_A M_{\mu>0}^+(\tau) = \tau L_{\mu}\rho_A L_{\mu}^+ + O(\tau^2) \quad (7-26)$$

ce qui revient à poser, pour $\mu > 0$:

$$M_{\mu}(\tau) = L_{\mu}\sqrt{\tau} \quad (7-27)$$

La relation de fermeture sur les M_{μ} permet enfin de relier les L_{μ} ($\mu>0$) à J .
Compte tenu de (7-25), on obtient:

$$M_0^+ M_0 + \sum_{\mu>0} M_{\mu}^+ M_{\mu} = I_A - 2J\tau + \sum_{\mu>0} \tau L_{\mu}^+ L_{\mu} = I_A \quad (7-28)$$

soit:

$$J = \frac{1}{2} \sum_{\mu>0} L_{\mu}^+ L_{\mu} \quad (7-29)$$

En regroupant finalement (7-23) et (7-26) et en tenant compte de (7-29), on obtient la forme de Lindblad de l'équation pilote:

$$\frac{d\rho_A(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho_A(t)] + \sum_{\mu>0} \left\{ L_{\mu}\rho_A(t)L_{\mu}^+ - \frac{1}{2} (L_{\mu}^+ L_{\mu}\rho_A(t) + \rho_A(t)L_{\mu}^+ L_{\mu}) \right\} \quad (7-30)$$

où les L_{μ} sont au plus N^2-1 opérateurs de A dont nous donnons maintenant l'interprétation physique.

Représentation unitaire de l'évolution infinitésimale décrite par l'équation de Lindblad

Pour donner une interprétation physique à la forme de Lindblad, reprenons le point de vue décrivant le super-opérateur comme résultant d'une évolution unitaire d'un système étendu $A + E_f$. Ici, E_f n'est pas l'environnement réel, mais un environnement effectif dont le couplage à A conduit à la même évolution de ρ_A .

Nous définissons dans E_f un état de référence $|0\rangle_f$ et un ensemble d'états $|\mu\rangle_f$ (orthogonaux entre eux et à $|0\rangle_f$) en nombre égal à celui des L_μ . Nous considérons la transformation unitaire dans $A+E_f$ définie par:

$$\begin{aligned}
 U_{AE_f} |\varphi\rangle_A \otimes |0\rangle_f &= M_0(\tau) |\varphi\rangle_A \otimes |0\rangle_f + \sum_{\mu>0} M_\mu(\tau) |\varphi\rangle_A \otimes |\mu\rangle_f \\
 &= \left[1_A - \frac{i}{\hbar} H\tau - J\tau \right] |\varphi\rangle_A \otimes |0\rangle_f + \sqrt{\tau} \sum_{\mu>0} L_\mu |\varphi\rangle_A \otimes |\mu\rangle_f \quad (7-31)
 \end{aligned}$$

Comme nous l'avons vu à la leçon 3, une mesure non lue dans E_f de l'observable admettant comme états propres les états $\{|0\rangle_f, |\mu\rangle_f\}$ prépare A dans l'état d'opérateur densité $\mathcal{E}_\tau(|\varphi\rangle_A \langle\varphi|)$ correspondant à l'évolution infinitésimale de l'état pur initial $|\varphi\rangle_A$ décrite par l'équation de Lindblad.

Lecture de l'environnement et sauts quantiques

Supposons maintenant que la lecture de l'environnement soit faite explicitement. Une telle situation se rencontre lorsque l'on observe continûment un système quantique unique couplé à un réservoir (par exemple, sauts quantiques d'un ion - voir leçon 1). A chaque pas, deux types d'événements différents peuvent se produire:

(i) L'environnement est trouvé inchangé:

Cet événement se produit avec la probabilité:

$$p_0(\tau) = {}_A \langle \varphi | M_0^+ M_0 | \varphi \rangle_A = 1 - 2\tau {}_A \langle \varphi | J | \varphi \rangle_A = 1 - \tau \sum_{\mu > 0} {}_A \langle \varphi | L_\mu^+ L_\mu | \varphi \rangle_A \quad (7-32)$$

et A est alors projeté dans l'état normé:

$$|\varphi\rangle_{A/0_f} = \frac{\left(1 - \frac{i}{\hbar} H\tau - J\tau\right) |\varphi\rangle_A}{\sqrt{p_0(\tau)}} \quad (7-33)$$

Ainsi, même si l'environnement n'est pas modifié et si $H=0$ (pas d'évolution propre), l'état de A peut changer (terme $\tau J | \varphi \rangle_A$). Nous reviendrons sur cet effet plus loin. (Constater que l'environnement n'est pas changé est une information sur le système et modifie donc la connaissance qu'on en a).

Sauts quantiques (suite)

(ii) L'environnement est trouvé dans un des états $|\mu\rangle_f$

Cet événement se produit avec la probabilité proportionnelle à τ :

$$p_\mu(\tau) = {}_A \langle \varphi | M_\mu^+ M_\mu | \varphi \rangle_A = \tau \quad {}_A \langle \varphi | L_\mu^+ L_\mu | \varphi \rangle_A \quad (7-34)$$

et A se trouve alors projeté dans l'état normé:

$$|\varphi\rangle_{A/\mu} = \frac{\sqrt{\tau} L_\mu |\varphi\rangle_A}{\sqrt{p_\mu(\tau)}} = \frac{L_\mu |\varphi\rangle_A}{\sqrt{{}_A \langle \varphi | L_\mu^+ L_\mu | \varphi \rangle_A}} \quad (7-35)$$

Les opérateurs L_μ décrivent comment les états de A sont transformés par une mesure projective de l'environnement. Ils sont appelés opérateurs de sauts quantiques du système. Ils correspondent à une transformation irréversible et instantanée de la fonction d'onde du système étudié.

On pourra retrouver en exercice qu'en sommant les différentes possibilités de résultats de mesure après un pas infinitésimal, on obtient l'évolution de l'opérateur densité donné par Lindblad. Il suffit de partir de:

$$\rho_A(\tau) = p_0(\tau) |\varphi\rangle_{A/0_f} \langle \varphi| + \sum_{\mu>0} p_\mu(\tau) |\varphi\rangle_{A/\mu} \langle \varphi| \quad (7-36)$$

et d'y substituer les expressions de $|\varphi\rangle_{A/0_f}$ et $|\varphi\rangle_{A/\mu}$ données par (7-33) et (7-35).

8.

Les trajectoires stochastiques (Méthode de Monte Carlo).

Simulation d'une mesure généralisée continue sur un système dont l'évolution est décrite par une équation pilote de Lindblad.

Les trajectoires stochastiques de l'état du système.

Evolution entre deux sauts quantiques et évolution sous l'effet d'un saut. Interprétation physique.

Retrouver l'opérateur densité comme moyenne sur les trajectoires quantiques.

Exemples simples: émission spontanée d'un atome à deux niveaux et décohérence d'un qubit.

Simulation Monte Carlo de l'évolution du système

Supposons que le système A, initialement préparé dans un état pur $|\varphi\rangle_A$ soit couplé à $t=0$ à l'environnement E_f et que l'on mesure de façon continue l'état de celui-ci (le système peut être, par exemple, un atome initialement excité couplé au rayonnement et l'expérience de pensée que l'on envisage alors consiste à détecter le photon émis. Nous revenons sur cet exemple plus loin).

On divise l'intervalle t en segments infinitésimaux, en supposant qu'une mesure de l'environnement est effectuée avec la périodicité τ . La 1ère mesure projette le système dans l'un des états donnés par (7-33) ou (7-35). Pour simuler le caractère aléatoire du résultat, on effectue un tirage au sort en choisissant un nombre aléatoire α_1 compris entre 0 et 1 et l'on prend la «décision» suivante:

$$\begin{aligned} 0 \leq \alpha_1 \leq p_0(\tau) & : & |\varphi\rangle_A & \rightarrow |\varphi\rangle_{A/\mu=0} \\ p_0(\tau) < \alpha_1 \leq p_0(\tau) + p_1(\tau) & : & |\varphi\rangle_A & \rightarrow |\varphi\rangle_{A/\mu=1} \end{aligned} \quad (8-1)$$

.....

$$p_0(\tau) + \sum_{\mu=1}^i p_{\mu}(\tau) < \alpha_1 \leq p_0(\tau) + \sum_{\mu=1}^{i+1} p_{\mu}(\tau) : |\varphi\rangle_A \rightarrow |\varphi\rangle_{A/\mu=i+1}$$

On simule ainsi l'effet de la 1ère mesure de l'environnement sur le système.

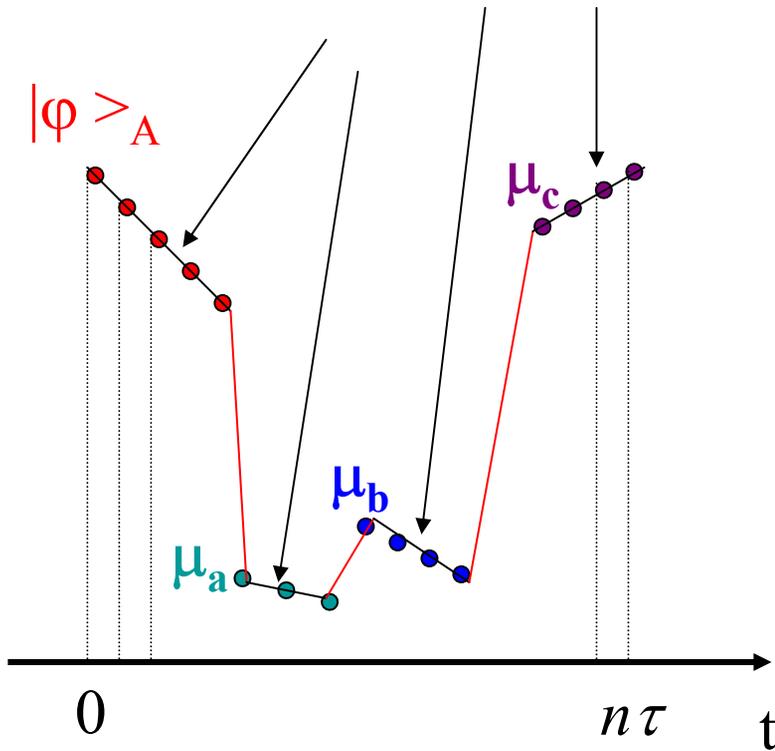
Simulation Monte Carlo (suite)

Pour le pas suivant, on «remet à zéro» l'environnement en le rétablissant dans son état initial $|0\rangle_f$. Nous cherchons en effet à simuler un super-opérateur infinitésimal stationnaire, décrit par le modèle défini plus haut où E_f est dans l'état $|0\rangle_f$ au début de chaque pas d'intégration. Cette procédure est justifiée par l'approximation de Markov. Elle exprime le fait que la modification de l'environnement est négligeable pour la description de l'évolution de A. Dans l'exemple de l'atome émettant des photons, cette remise à zéro de l'état du rayonnement signifie que le photon échappé ne revient jamais interagir avec l'atome (s'il est détecté, il est en général détruit...).

On part donc de l'état aléatoire $|\varphi_1\rangle_A = |\varphi\rangle_{A/\mu}$ donné par la première mesure de E_f et on itère le processus. On calcule les nouvelles probabilités $p_0^{(1)}(\tau)$ et $p_\mu^{(1)}(\tau)$ de trouver le résultat μ à l'instant 2τ sachant que A a été trouvé dans l'état $|\varphi_1\rangle_A$ à l'instant τ (on remplace pour cela $|\varphi\rangle_A$ par $|\varphi_1\rangle_A$ dans les équations (7-32) et (7-34)). On effectue un second tirage au sort d'un nombre aléatoire α_2 et en le comparant aux $p_0^{(1)}(\tau)$ et $p_\mu^{(1)}(\tau)$ de façon similaire à (8-1), on décide de l'état du système après la seconde mesure. On obtient ainsi l'état $|\varphi_2\rangle_A = |\varphi_1\rangle_{A/\mu}$ de A à l'instant 2τ . Puis on ré-initialise l'état de E_f et on recommence. On produit une succession d'états $|\varphi_1\rangle_A, |\varphi_2\rangle_A, \dots, |\varphi_n\rangle_A$ qui décrivent *une trajectoire aléatoire* de l'état du système A dans son espace de Hilbert H_A .

Les trajectoires stochastiques

Évolutions produites par
le « pseudo hamiltonien »
($H - iJ$)



Trajectoire définie par état initial $|\varphi \rangle_A$ et la donnée de la série des μ_i (« trace » laissée dans E_f). Comme $p_0^{(i)}(\tau)$ est voisin de 1 pour τ petit, une trajectoire typique est de la forme:

$$\mu = 0, 0, 0, \dots, \mu_a \neq 0, \mu = 0, 0, 0, \dots$$

$$\dots, \mu_b \neq 0, \mu = 0, 0, 0, \dots, \mu_c \neq 0, \mu = 0, 0, \dots$$

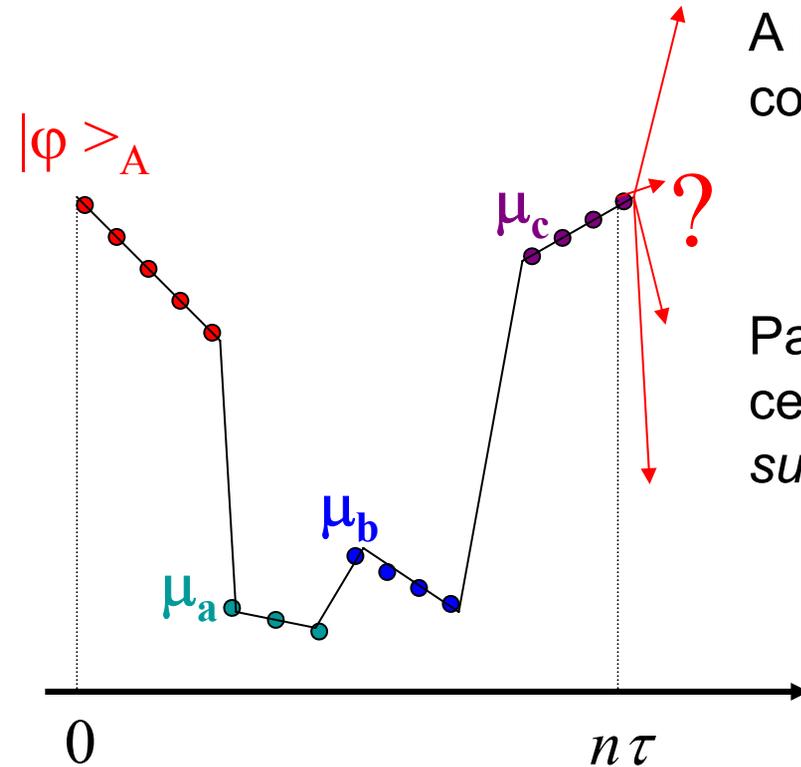
Les μ sont le plus souvent égaux à 0, avec de temps en temps un saut quantique correspondant à des valeurs

$$\mu_a, \mu_b, \mu_c, \dots \neq 0$$

Les intervalles en dehors des sauts correspondent à une évolution déterministe de l'état du système sous l'effet du pseudo hamiltonien non hermitique $H - iJ$.

*J. Dalibard, Y. Castin et K. Molmer,
Phys. Rev. Lett. 68, 580 (1992);
H. J. Carmichael, ouvrage cité à la
leçon 1.*

Moyenne des trajectoires stochastiques



A partir d'un grand nombre N de trajectoires, on construit un opérateur densité moyen à $t=n\tau$:

$$\overline{\rho}_A(n\tau) = \frac{1}{N} \sum_{\{\mu_i\}} |\varphi; \{\mu_i\}\rangle_{AA} \langle \varphi; \{\mu_i\}| \quad (8-2)$$

Par définition du processus, chaque terme de cette somme devient à $t=(n+1)\tau$, *en moyennant sur les états finals de E* :

$$\mathfrak{L}_\tau \left[|\varphi; \{\mu_i\}\rangle_{AA} \langle \varphi; \{\mu_i\}| \right] \quad (8-3)$$

La linéarité conduit alors directement à:

$$\overline{\rho}_A((n+1)\tau) = \mathfrak{L}_\tau \left(\overline{\rho}_A(n\tau) \right) \quad (8-4)$$

La relation (8-4) montre que $\overline{\rho}_A$ obéit à l'équation de Lindblad entre $n\tau$ et $(n+1)\tau$. C'est vrai de proche en proche entre 0 et $n\tau$. Comme $\overline{\rho}_A$ obéit à la même équation que ρ_A avec même état initial ($|\varphi >_A$), ces 2 opérateurs sont identiques: la moyenne des trajectoires reconstitue l'opérateur densité de A pour un cas pur. En cas de mélange initial, on construit les trajectoires associées à chacun des termes du mélange et on moyenne sur cet état initial.

Dans tous les cas, la moyenne des trajectoires redonne l'opérateur densité.

Simulation Monte Carlo de l'émission spontanée d'un atome à deux niveaux (qubit)

Appliquons les résultats généraux précédents à un exemple simple, l'émission spontanée d'un qubit (voir leçon 3). En posant dans les équations (6-26) $p = \Gamma\tau \ll 1$, nous obtenons immédiatement:

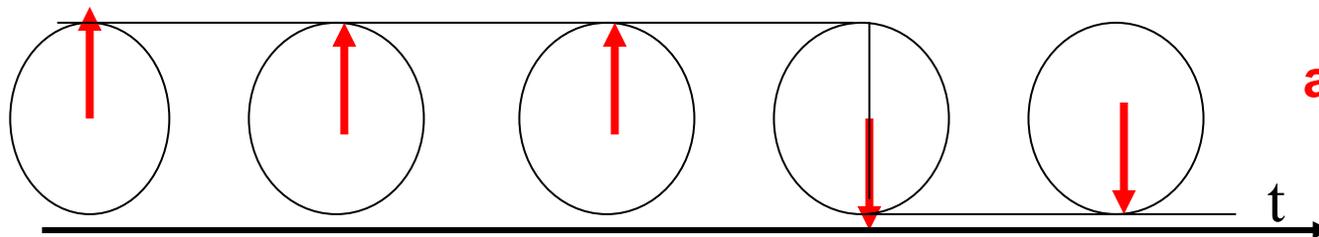
$$M_0 \approx \begin{pmatrix} 1 - \frac{\Gamma}{2}\tau & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I_A - \tau J \text{ avec } J = \frac{\Gamma}{2} |0\rangle\langle 0| \quad (8-5a); \quad M_1 = \sqrt{\Gamma\tau} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{\tau} L_1 \text{ avec } L_1 = \sqrt{\Gamma} |1\rangle\langle 0| \quad (8-5b)$$

et la forme de Lindblad de l'équation pilote pour le qubit s'écrit:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\Gamma}{2} (|0\rangle\langle 0|\rho + \rho|0\rangle\langle 0|) + \Gamma |1\rangle\langle 0|\rho|0\rangle\langle 1| \quad (8-6)$$

Atome initialement excité: $|\varphi\rangle_A = |0\rangle$:

Avec la proba. $1 - \Gamma\tau$, A reste dans $|0\rangle_A$. Avec la proba. $\Gamma\tau$, $|\varphi\rangle_A \rightarrow |1\rangle_A$. Si A est resté dans $|0\rangle_A$, le processus recommence jusqu'à ce que l'atome subisse le saut $0 \rightarrow 1$. Après ce saut, A reste dans $|1\rangle_A$.



Saut à un instant aléatoire. Evolution en marche d'escalier. Comportement exponentiel moyen

Emission spontanée d'un atome initialement dans une superposition des états excité et fondamental

Considérons comme état initial $|\varphi\rangle_A = \cos(\theta/2)|0\rangle + \sin(\theta/2)|1\rangle$ et effectuons le premier pas du calcul de la trajectoire stochastique:

$$\text{avec probabilité } p_0(\tau) = 1 - 2\tau \langle \varphi | \mathcal{J} | \varphi \rangle_A = 1 - \Gamma \tau \cos^2(\theta/2) \quad (8-7a)$$

$$|\varphi\rangle_A \rightarrow \frac{|\varphi\rangle_A - \frac{\Gamma\tau}{2}|0\rangle\langle 0|\varphi\rangle_A}{\sqrt{p_0(\tau)}} = \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\left(1 - \frac{\Gamma\tau}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle}{\sqrt{p_0(\tau)}} \quad (8-7b)$$

S'il n'y a pas de « photon » détecté dans E, on obtient une « rotation » continue du vecteur de Bloch

$$\text{avec probabilité } p_1(\tau) = \Gamma \tau \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right): \quad (8-8a)$$

$$|\varphi\rangle_A \rightarrow |1\rangle \quad (8-8b)$$

Si un photon est émis dans E: on a un saut brutal et irréversible du vecteur de Bloch vers $|1\rangle$

Emission spontanée d'un atome dans une superposition des états excité et fondamental (suite)

Rotation infinitésimale du vecteur de Bloch en absence de saut:

$$\tan\left(\frac{\theta + \delta\theta}{2}\right) = \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) + \frac{\delta\theta}{2\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \approx \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)\left(1 + \frac{\Gamma\tau}{2}\right) \rightarrow \frac{\delta\theta}{\sin\theta} \approx \frac{\Gamma\tau}{2} \quad (8-9)$$

En intégrant, on obtient l'équation donnant l'angle de rotation $\phi(t)$ du vecteur de Bloch pendant l'évolution qui précède le saut quantique:

$$\frac{d\theta}{\sin\theta} = d\log\left(\tan\frac{\theta}{2}\right) = \frac{\Gamma dt}{2} \rightarrow \tan\frac{\theta + \phi(t)}{2} = \tan\frac{\theta}{2} e^{\Gamma t/2} \quad (8-10)$$

Emission spontanée d'un atome dans une superposition des états excité et fondamental (suite)

Probabilité pour que le saut n'ait pas lieu avant t:

$$p_0(t + dt) = p_0(t) \left[1 - \Gamma dt \cos^2 \left(\frac{\theta + \phi(t)}{2} \right) \right] \rightarrow$$
$$\frac{dp_0}{dt} = -\Gamma \cos^2 \left(\frac{\theta + \phi(t)}{2} \right) p_0 = -\frac{\Gamma p_0}{1 + \tan^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{\Gamma t}} \rightarrow$$
$$p_0(t) = \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-\Gamma t} \quad (8-11)$$

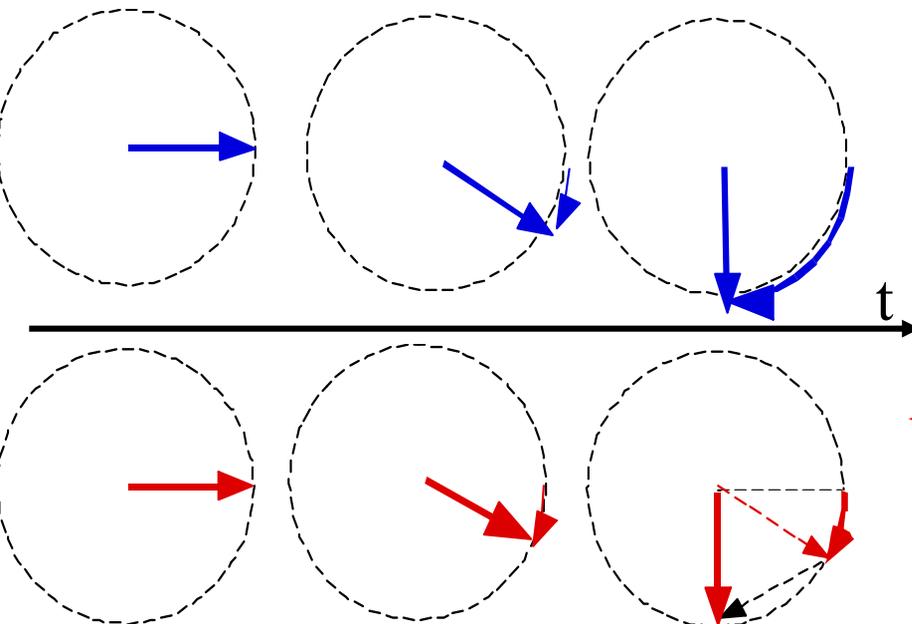
A la limite t infini, $p_0 = \sin^2(\theta/2)$, probabilité que l'atome soit initialement dans $|1\rangle$ et donc ne puisse émettre de photon...

Emission spontanée d'un atome dans une superposition des états excité et fondamental (fin)

Si à $t = 0$ A est dans $|\varphi\rangle_A = (1/\sqrt{2})(|0\rangle + |1\rangle)$ ($\theta = \pi/2$) les équ. (8-10,-11) donnent:

$$\tan\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\phi(t)}{2}\right) = e^{\Gamma t/2} \quad (8-12a); \quad p_0(t) = \frac{1 + e^{-\Gamma t}}{2} \quad (8-12b)$$

Avec une probabilité de 50% le vecteur de Bloch évolue sans saut quantique vers l'état $|1\rangle$, correspondant à $\phi(t=\infty) = \pi/2$. Avec la probabilité complémentaire de 50% il tourne d'un angle inférieur à $\pi/2$ avant de subir un saut vers l'état $|1\rangle$. Ainsi les trajectoires quantiques du vecteur de Bloch se classent en deux catégories, de probabilités égales, représentées par les figures ci-dessous.



Rotation continue sans saut du vecteur de Bloch

Rotation continue du vecteur de Bloch, suivie d'un saut vers le pôle sud de la sphère de Bloch, puis immobilité

Même état final pour les deux types de trajectoires, mais leur interprétation physique est très différente

Interprétation de l'évolution sans saut du qubit au cours de l'émission spontanée d'une superposition d'états: acquisition continue d'information

L'état initial est dans une superposition, à poids égaux d'un état atomique émetteur (0) et d'un état stable (1). Il ne peut émettre, en moyenne que dans la moitié des cas. Rien ne permet *a priori* de décider si, dans une réalisation de l'expérience de pensée, l'atome va émettre ou non. Il faut cependant que dans tous les cas l'atome finisse avec certitude dans l'état stable 1. Comment est-ce possible? Si l'atome émet un photon, l'explication est simple: c'est le saut quantique corrélé au changement d'état de l'environnement qui explique l'évolution irréversible de l'atome vers son état final.

Mais que se passe-t-il si E_f ne change pas? Il faut admettre que le fait de ne détecter aucun photon est aussi une information sur l'état de l'atome. Plus le temps passe, plus il devient probable que l'atome ne peut émettre et se trouve donc dans $|1\rangle$. C'est ce qu'exprime la rotation du vecteur de Bloch vers le pôle sud de la sphère de Bloch. Dans la moitié des cas, cette rotation conduit le système continûment vers $|1\rangle$, sans qu'aucun photon n'ait été émis! Ainsi l'évolution due au terme anti-commutateur de l'expression de Lindblad de l'équation pilote décrit l'évolution continue de l'état du système produite par l'information acquise sur lui par le constat que E_f est resté inchangé!

Trajectoires Monte Carlo décrivant la décohérence d'un qubit: basculement de phase

Envisageons maintenant la décohérence d'un qubit décrite à la leçon 3 en l'analysant à l'aide des trajectoires stochastiques. A est à $t=0$ dans $|\varphi\rangle_A = (1/\sqrt{2})(|0\rangle_z + |1\rangle_z)$. Comparons les descriptions correspondant à deux formes d'équations de Lindblad équivalentes. Les deux correspondent à un état final identique, de matrice densité unité:

$$\rho_A(t \rightarrow \infty) = (1/2)(|0\rangle_{xx}\langle 0| + |1\rangle_{xx}\langle 1|) = (1/2)(|0\rangle_{zz}\langle 0| + |1\rangle_{zz}\langle 1|) = (1/2)I_A \quad (8-13)$$

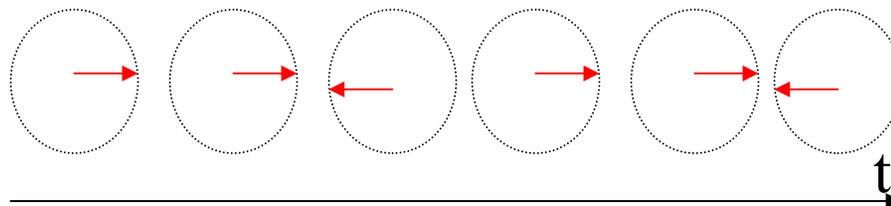
(i) Basculement de phase (voir eq. (6-8):

$$M_0 = \sqrt{1 - \gamma\tau/2} I \approx I - \tau J \text{ avec } J = \frac{\gamma}{4} I \quad (8-14a)$$

$$M_1 = \sqrt{\gamma\tau/2} Z = \sqrt{\tau} L_1 \text{ avec } L_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{2}} Z \quad (8-14b)$$

Si E inchangé: A reste dans $|\varphi\rangle_A$ (pas de rotation dans ce cas car M_0 proportionnel à I)

Si E change, la phase du qubit bascule: $|0\rangle_z + |1\rangle_z \rightarrow |0\rangle_z - |1\rangle_z$ et inversement



*Processus
stochastique
stationnaire*

Trajectoires Monte Carlo décrivant la décohérence d'un qubit: diffusion dans E_f

(ii) Décohérence par diffusion (voir eq. (6-22):

$$N'_0 \approx I - \gamma\tau|1\rangle\langle 1| = I - \tau J' \text{ avec } J' = \gamma|1\rangle\langle 1| \quad (8-15a)$$

$$N'_1 \approx \sqrt{2\gamma\tau}|1\rangle\langle 1| = \sqrt{\tau}L'_1 \text{ avec } L'_1 = \sqrt{2\gamma}|1\rangle\langle 1| \quad (8-15b)$$

En absence de saut, le vecteur de Bloch tourne vers la direction de $|0\rangle$ (*ne pas détecter de changement dans E_f augmente la probabilité que A soit dans $|0\rangle$*). **Un saut projette A dans $|1\rangle$** . Une fois dans $|1\rangle$, A n'évolue plus. La probabilité qu'il n'y ait pas de saut tend vers 1/2 pour t infini. Situation analogue à l'émission spontanée, avec deux types de trajectoires d'égales probabilités.



Intérêt des simulations Monte Carlo

Les trajectoires stochastiques donnent une description de l'évolution de A complémentaire de celle donnée par $\rho_A(t)$. Si l'environnement est observé continûment, A reste dans un état pur, mais celui-ci varie aléatoirement. La moyenne sur cet état pur aléatoire redonne l'opérateur densité. En général, l'observation continue de E_f correspond à une expérience de pensée et la simulation Monte Carlo est employée comme une méthode strictement équivalente à la résolution de l'équation pilote. Si la dimension de l'espace de A est grande, il peut être avantageux de moyennner un nombre fini de trajectoires d'un état développé sur une base à N dimensions plutôt que de résoudre une équation différentielle pour un opérateur densité à N^2 éléments de matrice.

La méthode stochastique s'impose lorsque l'on cherche à décrire une expérience réelle de mesure continue sur un système quantique unique (ion effectuant des sauts quantiques, champ dans une cavité dans une expérience de type CQED...voir leçon 1). On calcule alors des trajectoires typiques et on en étudie la statistique sur un ensemble de simulations Monte Carlo. La nature des trajectoires dépend du choix des opérateurs de Lindblad. Ce choix est fonction de l'expérience que l'on cherche à simuler car il détermine le type de mesure généralisée effectuée sur A . Nous revenons sur ce point plus loin.

Conclusions de la quatrième leçon

Nous avons établi une forme très générale, dite de Lindblad, de l'équation pilote pour l'opérateur densité d'un système ouvert couplé à un environnement. Cette équation n'existe que si le couplage du système à son environnement satisfait à l'approximation de Markov, condition de mémoire courte du couplage système - réservoir, due à la grande taille de ce dernier. L'évolution infinitésimale du système décrite par l'équation pilote est équivalente à une mesure généralisée non lue du système étudié.

Les opérateurs de Lindblad qui apparaissent dans cette équation sont associés aux sauts quantiques du système. Tout comme la forme de Kraus du super-opérateur d'évolution dont elle dérive, la forme de Lindblad de l'équation pilote peut prendre une infinité d'expressions équivalentes, avec des opérateurs de Lindblad différents. Ceci traduit le fait qu'une même évolution du système peut être décrite comme résultant de différents types de mesures non lues.

Les opérateurs de Lindblad sont utilisés pour simuler des réalisations uniques d'expériences sur le système. Les trajectoires stochastiques que l'on obtient ainsi peuvent être moyennées pour retrouver l'expression de l'opérateur densité en fonction du temps. Différents exemples d'évolution stochastiques de qubits ont été décrits et interprétés physiquement.