

Information quantique

Transformée de Fourier quantique

Introduction

Fonder un système de traitement de l'information sur la logique quantique plutôt que sur la logique classique permettrait de résoudre infiniment plus efficacement certains problèmes difficiles comme la factorisation de grands nombres. La puissance du calcul quantique trouve son origine dans la faculté d'un système quantique de se trouver dans une superposition d'un nombre gigantesque d'états. Dans ce bureau d'étude, nous examinerons les grands principes de l'informatique quantique, ainsi qu'un exemple d'algorithme quantique permettant de calculer une transformée de Fourier à une vitesse théoriquement beaucoup plus élevée que celles des algorithmes classiques les plus performants. Il est à noter qu'une réalisation expérimentale de cet algorithme a été réalisée en utilisant la technique de la RMN que nous étudierons dans la dernière partie.

Une synthèse des propriétés de l'information quantique est présentée dans l'article qui servira d'introduction à ce bureau d'étude : « Les lois nouvelles de l'information quantique », J.-P. Delahaye, Pour la science n° 250 Août 1998 pp. 66-72.

Partie 1 : Notion de qu-bit

L'objectif de cette partie est de comprendre la notion de qu-bit à travers des expériences manipulant un paramètre quantique décrivant l'état de polarisation d'une particule quantique bien connue, porteuse de l'information lumineuse : le photon.

Classiquement, la polarisation de la lumière est reliée à l'orientation du champ électrique de l'onde lumineuse. Plutôt que de travailler avec la description classique, nous allons plutôt considérer les *états de polarisation* des photons individuels qui composent le faisceau lumineux.

On décrit les états de polarisation d'un photon dans un espace de Hilbert de dimension 2. Dans cet espace, nous choisissons comme états de base les états de polarisations linéaires suivant la verticale (Ox) et l'horizontale (Oy) (cf. figure 1), notés : $|x\rangle$ et $|y\rangle$.

Ces états sont définis physiquement par le fait que si le photon est dans l'état de polarisation $|x\rangle$ il passe dans un polariseur d'axe horizontal avec une probabilité de 1; s'il est dans l'état $|y\rangle$, il est absorbé par ce même polariseur (il passe avec la probabilité 0). Par définition, ces états sont normés et orthogonaux : $\langle y|y\rangle = \langle x|x\rangle = 1$ et $\langle y|x\rangle = 0$.

Une façon de voir les choses est de considérer que le résultat d'une mesure du paramètre physique *polarisation du photon* grâce à un polariseur est soit 1 si le photon passe le polariseur, soit 0 si le polariseur absorbe le photon. Ceci permet par exemple de définir l'opérateur P_x décrivant la *polarisation du photon selon Ox* qui, dans la base orthonormée $\{|x\rangle, |y\rangle\}$, a pour expression matricielle :

$$P_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

La polarisation des photons peut être utilisée pour transmettre de l'information par exemple par une fibre optique. On décide arbitrairement, d'attribuer la valeur 0 du bit à un photon polarisé suivant Ox et la valeur 1 à un photon polarisé suivant Oy . En information quantique, les personnes qui échangent de l'information sont appelés conventionnellement Alice et Bob. Alice envoie par

exemple à Bob une suite de photons polarisés suivant $yyxyxyyx\dots$. Bob analyse la polarisation de ces photons à l'aide d'une lame biréfringente (cf. figure 1) et en déduit le message d'Alice 1101010011.

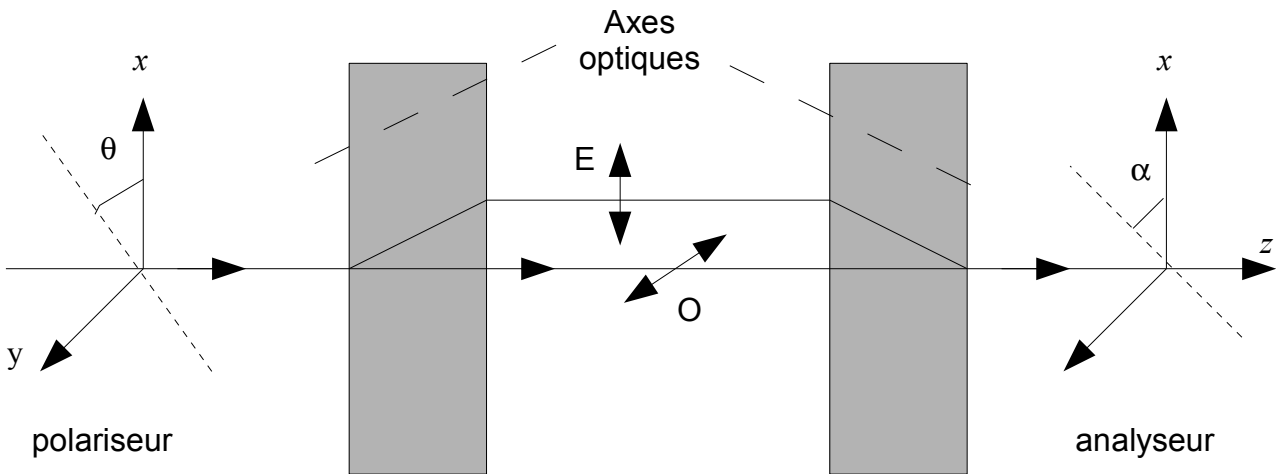


Figure 1 : Décomposition et recombinaison de polarisations à l'aide de lames biréfringentes. Le photon peut choisir le trajet E (extraordinaire), où il est polarisé suivant Ox , ou le trajet O (ordinaire), où il est polarisé suivant Oy .

De façon générale, un état quelconque de polarisation est noté : $|\phi\rangle = \lambda|x\rangle + \mu|y\rangle$, où α et β sont des nombres complexes tels que $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$.

On considère un photon dont l'état de polarisation est linéaire et fait un angle θ avec la verticale Ox .

1. Déterminer les valeurs de λ et μ
2. Déterminer la probabilité pour que ce photon emprunte le trajet E puis celle pour qu'il emprunte le trajet O .
3. Déterminer la probabilité pour que le photon traverse l'analyseur orienté suivant l'angle α (cf. figure 1). Quelle loi de l'optique ondulatoire reconnaissez-vous ?
4. On mesure l'état de polarisation du photon entre les lames biréfringentes et on le trouve polarisé selon Ox . Recalculer la probabilité pour que le photon traverse l'analyseur orienté suivant l'angle α . Comparer ce résultat à celui de la question précédente et commenter.
5. Déterminer l'expression de la matrice de l'opérateur décrivant la polarisation du photon selon un angle θ avec Ox dans la base orthonormée $\{|x\rangle, |y\rangle\}$.

A priori on peut faire varier l'angle θ continuellement, ce qui en un certain sens permet au qu-bit $|\phi\rangle$ de prendre toutes les valeurs intermédiaires entre 0 et 1. Le qu-bit contiendrait donc une quantité infinie d'information !!

6. Pourquoi cet énoncé optimiste est-il immédiatement démenti lorsqu'on analyse le processus de mesure¹ ?

Dans la suite, nous noterons $|0\rangle$ et $|1\rangle$ les deux vecteurs de base de l'espace de Hilbert

¹ Malgré tout, cette « information cachée » dans la superposition linéaire peut être exploitée sous certaines conditions que nous examinerons dans la partie 3.

des qu-bits.

Nous nous intéressons maintenant à la manipulation de 2 qu-bits. Nous verrons que cette structure à 2 qu-bits est extraordinairement riche car elle introduit des corrélations quantiques (configurations dites *intriquées*) entre les 2 qu-bits qui sont à la base des spécificités du calcul quantique.

La construction d'un état à 2 qu-bits repose sur la notion de produit tensoriel¹. Pour construire mathématiquement un état à 2 qu-bits, nous supposons que le premier qu-bit, A, vit dans un espace de Hilbert H_A , dont une base orthonormée est $\{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$, et le second qu-bit dans un espace de Hilbert H_B , dont une base orthonormée est $\{|0\rangle_B, |1\rangle_B\}$. Il apparaît naturel de représenter un état physique où le premier qu-bit est dans l'état $|0\rangle_A$ et le second dans l'état $|1\rangle_B$ par un vecteur $|0_A 1_B\rangle = |01\rangle = |0\rangle_A \otimes |1\rangle_B$. De cette façon, on construit une base de l'espace produit tensoriel $H_A \otimes H_B$, $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$, dans laquelle peut agir le produit tensoriel de deux opérateurs M_A (agissant dans H_A) et M_B (agissant dans H_B), $M_A \otimes M_B$.

Dans l'espace $H_A \otimes H_B$, un état qui n'est pas de la forme dite *factorisée* $|\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ est appelé *état intriqué*. Examinons les propriétés de ces états intriqués.

Prenons par exemple l'état intriqué à deux qu-bits : $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$.

Supposons que nous voulions mesurer la probabilité de trouver le qu-bit A dans l'état 0 puis déterminer l'état du système à deux qu-bits après la mesure.

Rappelons que l'opération mathématique qui correspond à une mesure est une projection. Si l'on désire mesurer seulement le qu-bit A de l'état $|\psi\rangle$ dans l'état 0, on peut utiliser l'opérateur produit tensoriel :

$$M_{0_A} = (|0\rangle\langle 0|)_A \otimes I_B,$$

où $(|0\rangle\langle 0|)_A$ est un opérateur de H_A correspondant au projecteur sur l'état $|0\rangle_A$ et I_B l'opérateur identité dans la base $\{|0\rangle_B, |1\rangle_B\}$ de H_B .

7. Déterminer l'expression matricielle de $(|0\rangle\langle 0|)_A$ dans la base $\{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$.
8. En utilisant le produit de Kronecker d'opérateurs² déterminer l'expression matricielle de l'opérateur M_{0_A} dans la base $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$.
9. En déduire via des produits matriciels la probabilité de trouver le qu-bit A dans l'état 0 lorsque l'état du système est $|\psi\rangle$, puis l'état du système à l'issue d'une mesure du qu-bit A.
10. Que dire de l'état du qu-bit B à l'issue de la mesure faite sur le qu-bit A ?

La situation obtenue précédemment peut paraître surprenante car on a l'impression que la mesure faite sur le qu-bit A dévoile instantanément (donc à une vitesse supérieure à celle de la lumière !!) l'information sur l'état du qu-bit B. Cette situation peu banale³ ou deux objets quantiques sont fortement corrélés ne peut se satisfaire d'une explication classique : même si les qu-bits A et B sont éloignés de plusieurs années lumière, on ne peut pas les considérer comme des entités séparées et il n'existe pas de cas classique susceptible de reproduire ces corrélations. Les qu-bits forment une entité unique, ils sont non séparables, en un mot ils sont intriqués.

¹ cf. annexe

² cf. annexe paragraphe 4.

³ qui fut à l'origine d'une controverse sur l'interprétation de la mécanique quantique. Initiée en 1935 par Einstein, Podolski et Rosen (Phys. Rev. 47,777 (1935)).

Partie 2 : Logique quantique

Il est facile de représenter des nombres entiers au moyen de qu-bits en calquant ce qui est fait avec des bits ordinaires. Supposons que nous voulions inscrire dans un registre de qu-bits un nombre entre 0 et 7. Un système de 3 qu-bits fera l'affaire en faisant correspondre ces nombres aux 8 états suivants¹ :

$$0:|000\rangle \quad 1:|001\rangle \quad 2:|010\rangle \quad 3:|011\rangle \quad 4:|100\rangle \quad 5:|101\rangle \quad 6:|110\rangle \quad 7:|111\rangle .$$

La généralisation à n qu-bits se fait sans difficultés : pour représenter un nombre inférieur à $N = 2^n$, il faudra n qu-bits de l'espace de Hilbert produit tensoriel de rang n $H^{\otimes n} = H \otimes H \otimes \dots \otimes H$. La base de cet espace formée des 2^n vecteurs orthonormaux $\{|00\dots00\rangle, |00\dots01\rangle, \dots, |11\dots11\rangle\}$ est appelée *base de calcul*.

L'ordinateur quantique est constitué de portes logiques *quantiques*. La porte quantique la plus générale est une matrice unitaire $2^n \times 2^n$ opérant dans $H^{\otimes n}$.

On utilise couramment les portes suivantes qui n'agissent que sur un qu-bit :

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} .$$

La porte *cNOT* ou *controled-NOT* est une porte à 2 qu-bits dont l'action sur un qu-bit $|xy\rangle$ est la suivante : elle ne modifie pas le qu-bit $|y\rangle$, ou qu-bit cible, si le qu-bit $|x\rangle$, ou qu-bit de contrôle, est dans l'état $|0\rangle$, et elle effectue sur le qu-bit cible l'échange $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ si le qu-bit de contrôle est dans l'état $|1\rangle$. L'action de la porte cNOT est schématisée sur la figure 2. Le point noir représente le bit de contrôle et le cercle le bit cible. L'opération \oplus est l'addition modulo 2 (OU exclusif).

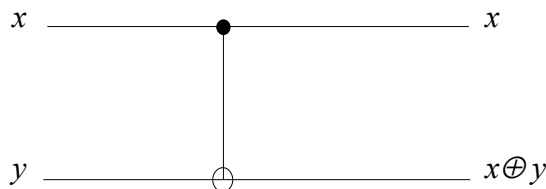


Figure 2. Porte cNOT (controled-NOT). Le point noir représente le bit de contrôle et le cercle le bit cible.

La porte de Toffoli à 3 qu-bits est représentée sur la figure 3.

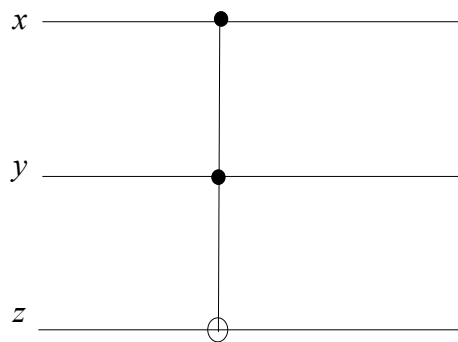


Figure 3. Porte de Toffoli.

¹ La notation produit tensoriel est omise : par exemple $|010\rangle$ est la notation abrégé de $|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B \otimes |0\rangle_C$

1. Parmi les portes X, Y, Z, I et H laquelle est équivalente à l'opération logique NOT ?
2. Déterminer l'expression de la matrice de l'opérateur cNOT dans la base de calcul $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$.
3. Déterminer la table de vérité de la porte cNOT.
4. A quelle opération est équivalente l'association des trois portes cNOT de la figure 4 ?
5. Déterminer la table de vérité de la porte de Toffoli (cf. figure 3). Montrer que si $z = 1$, cette porte effectue l'opération NAND.

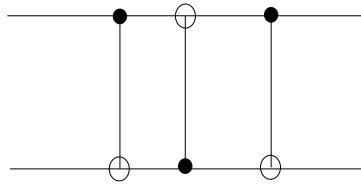


Figure 4.

Partie 3 : Transformée de Fourier quantique

L'algorithme quantique le plus efficace à l'heure actuelle est un algorithme de factorisation du à Shor. Il utilise un circuit logique quantique permettant de construire une transformée de Fourier. Cette TF quantique, à l'instar de la TF classique, est amenée à jouer un rôle fondamentale en informatique quantique pour résoudre différentes classes de problèmes¹.

Soit un nombre entier $n, 0 \leq n \leq 2^p - 1$, écrit avec p bits et $|n\rangle = |n_0 n_1 \dots n_{p-1}\rangle$, $n_i = 0$ ou 1 , un vecteur de la base de calcul.

On pose $N = 2^p$, le nombre de vecteurs de la base de calcul.

On définit l'opérateur U_{FT} , dont les éléments de matrice dans la base de calcul sont :

$$\langle k | U_{FT} | n \rangle = \frac{1}{2^{p/2}} e^{i2\pi kn/2^p} .$$

Par exemple : $\langle 0 | U_{FT} | 0 \rangle = 1$, $\langle 1 | U_{FT} | 1 \rangle = \frac{1}{2^{p/2}} e^{i2\pi/2^p}$, ...

Considérons une séquence $x[n]$ telle que $\sum_{n=0}^{2^p-1} |x[n]|^2 = 1$, et un état $|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^p-1} x[j] |j\rangle$.

L'action de U_{FT} sur l'état $|\psi\rangle$ donne un état $|\phi\rangle = \sum_{k=0}^{2^p-1} y_N^\circ[k] |k\rangle$.

Cette action transforme donc la séquence $x[n]$ en la séquence² $y_N^\circ[k]$ (cf. figure 5).

1 Pour une excellente synthèse sur l'informatique quantique, voir l'ouvrage de M. Nielsen « Quantum Computation and Quantum Information », Cambridge University Press, 2005, (pp 216-247 pour la TF quantique)

2 On utilise les mêmes notations qu'en cours de traitement numérique du signal

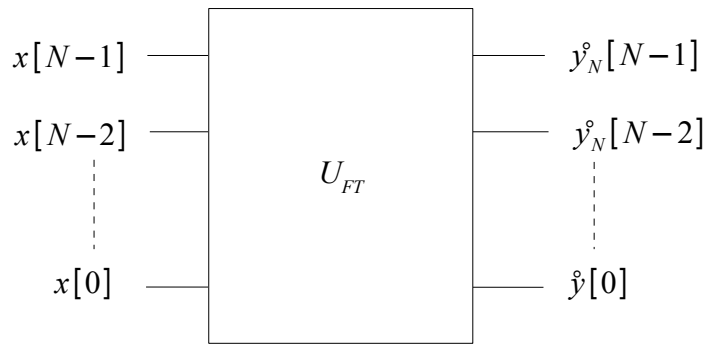


Figure 5. Transformée de Fourier quantique

1. Montrer que l'action de U_{FT} sur l'état $|n\rangle$ donne l'état $U_{FT}|n\rangle = \frac{1}{2^{p/2}} \sum_{j=0}^{2^p-1} e^{i2\pi kn/2^p} |k\rangle$.
2. Déterminer l'expression de $y_N^o[k]$ en fonction de $x[n]$ en faisant agir U_{FT} sur l'état $|\psi\rangle$.
Quelle transformation reconnaissez-vous ?
3. Montrer que l'opérateur U_{FT} est unitaire.

Pour simplifier l'expression de $U_{FT}|n\rangle$, on utilise une technique standard des transformées de Fourier rapides en décomposant en binaire les entiers n et k :

$$n = n_0 + 2n_1 + \dots + 2^{p-1}n_{p-1}$$

$$k = k_0 + 2k_1 + \dots + 2^{p-1}k_{p-1} .$$

On introduit la notation (représentation binaire d'un nombre inférieur à 1) :

$$n_p n_{p-1} \dots n_1 n_0 = \frac{n_p}{2} + \frac{n_{p-1}}{2^2} + \dots + \frac{n_0}{2^p} .$$

On peut alors factoriser le résultat du calcul de $U_{FT}|n\rangle$ de la question 1 de la façon suivante :

$$U_{FT}|n\rangle = \frac{1}{2^{p/2}} \sum_{k_0, k_1, \dots, k_{p-1}} e^{i2\pi k_0 \cdot n_{p-1} \dots n_0} \dots e^{i2\pi k_{p-1} \cdot n_0} |k_0 \dots k_{p-1}\rangle .$$

Pour fixer les idées, on peut prendre l'exemple $p = 3, N = 2^3 = 8$, le produit $kn/8$ dans l'exponentielle peut être remplacé par

$$\frac{kn}{8} \rightarrow k_0 \left(\frac{n_2}{2} + \frac{n_1}{4} + \frac{n_0}{8} \right) + k_1 \left(\frac{n_1}{2} + \frac{n_0}{4} \right) + k_2 \frac{n_0}{2} = k_0 \cdot n_2 n_1 n_0 + k_1 \cdot n_1 n_0 + k_2 \cdot n_0 .$$

4. Factoriser l'expression de $U_{FT}|n\rangle$ en deux temps, d'abord sous la forme

$$U_{FT}|n\rangle = \frac{1}{2^{p/2}} \sum_{k_0} \alpha_0 |k_0\rangle \sum_{k_1} \alpha_1 |k_1\rangle \dots \sum_{k_{p-1}} \alpha_{p-1} |k_{p-1}\rangle ,$$

puis sous la forme

$$U_{FT}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + \beta_0 |0\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + \beta_1 |0\rangle) \dots \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + \beta_{p-1} |0\rangle) .$$

Pour construire le circuit quantique d'opérateur U_{FT} , on utilise la porte Hadamard H et

l'opérateur *controlled-R_d* qui réalise l'action suivante sur le qu-bit cible , si le qu-bit de contrôle est dans l'état $|1\rangle$:

$$R_d = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/2^d} \end{pmatrix} .$$

9. On se place dans le cas particulier où $p = 3, N = 2^3 = 8$ et on considère le circuit de la figure 9.

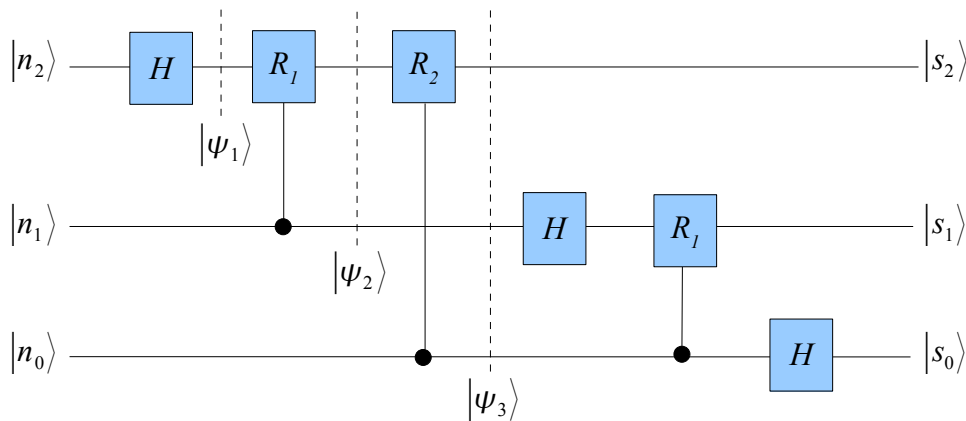


Figure 6.

5. Déterminer les expressions des états $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, et $|\psi_3\rangle$.
6. Montrer que les états $|s_{1,2,3}\rangle$ s'écrivent sous la forme $|s_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + \beta_{1,2,3}|1\rangle)$. En déduire que le circuit de la figure 6 réalise bien une TFD quantique d'ordre 3.
7. En généralisant le résultat précédent, proposer un circuit permettant de calculer une TFD quantique d'ordre N.
8. Sur le circuit proposé, calculer le nombre de portes H et le nombre de portes *cR_d* .
9. En supposant que chacune de ces portes réalise une opération quantique élémentaire, calculer le nombre C_{TFDQ} d'opérations quantiques élémentaires pour réaliser une TDF quantique d'ordre N.
10. Calculer le nombre C_{TFDC} d'additions et de multiplications nécessaires pour calculer une TFD classique. Comparer C_{TFDC} et C_{TFDQ} . Conclusion ?
11. En fait il existe des algorithmes dits « rapides » pour ramener C_{TFDC} à un ordre de $N \cdot \ln_2(N)$. Cela est-il suffisant pour concurrencer la rapidité de la TFD quantique ?

Partie 4 : Réalisation physique

Dans cette partie, on se propose de montrer un exemple de réalisation physique de portes quantiques à un seul qu-bit¹. Le record du nombre de qu-bits manipulés physiquement a été établi en 2001 par un « ordinateur quantique » utilisant la Résonance Magnétique Nucléaire. Cette technique utilisée principalement pour déterminer la structure de molécules d'intérêt chimique ou biologique, repose sur l'interaction entre le spin 1/2 d'un proton² et la superposition d'un champ magnétique

¹ La réalisation physique de portes à deux qu-bit présente une complexité dépassant le cadre de ce B.E.

² Celui d'une molécule d'eau par exemple, exploité dans le cadre de l'IRM (Imagerie par Résonance Magnétique)

statique $B_0 \vec{z}$ et radiofréquence (RF) $B_1(\vec{x} \cos \omega t - \vec{y} \sin \omega t)$ ¹. Dans ce cadre les qu-bits sont bien entendu les protons ou plus spécifiquement leur spin.

On admettra que le hamiltonien décrivant une telle interaction s'écrit² :

$$H(t) = \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{i\omega t} \\ \omega_1 e^{-i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix},$$

avec $\omega_0 = \gamma_p B_0$ et $\omega_1 = \gamma_p B_1$ où le paramètre γ_p est le facteur gyromagnétique du proton.

On s'intéresse à l'évolution d'un vecteur d'état sous la forme :

$$|\phi(t)\rangle = \lambda(t)|0\rangle + \mu(t)|1\rangle, \text{ avec } |\lambda(t)|^2 + |\mu(t)|^2 = 1.$$

1. En écrivant l'équation de Schrodinger matriciellement, déterminer le système d'équations différentielles couplées auquel obéissent $\lambda(t)$ et $\mu(t)$. On mettra ce système sous la forme :

$$i \frac{d\lambda(t)}{dt} = \dots$$

$$i \frac{d\mu(t)}{dt} = \dots$$

2. En posant $\lambda(t) = \hat{\lambda}(t)e^{i\omega_0 t/2}$ et $\mu(t) = \hat{\mu}(t)e^{-i\omega_0 t/2}$ réécrire le système sous la forme :

$$i \frac{d\hat{\lambda}(t)}{dt} = \dots$$

$$i \frac{d\hat{\mu}(t)}{dt} = \dots$$

3. Montrer que dans le cas de la résonance $\omega = \omega_0$, la solution du système est alors :

$$\hat{\lambda} = a \cos(\omega_1 t/2) + b \sin(\omega_1 t/2)$$

$$\hat{\mu} = ia \sin(\omega_1 t/2) + ib \cos(\omega_1 t/2)$$

4. Partant d'un qu-bit initial $|\phi(0)\rangle = |0\rangle$ i.e. $\lambda(0) = 1$ et $\mu(0) = 0$, déterminer l'expression de la probabilité $p_{0 \rightarrow 1}(t)$ pour que le qu-bit se retrouve dans l'état $|1\rangle$. Représenter graphiquement $p_{0 \rightarrow 1}(t)$.
5. Dédire de l'expression de $p_{0 \rightarrow 1}(t)$, qu'au bout d'un temps $t = t_{\pi/2}$ le qu-bit est dans un état de superposition de $|0\rangle$ et de $|1\rangle$.
6. Combien de temps faut-il laisser le champ RF pour réaliser à un facteur de phase près une porte X ?

Conclusion

1 Cas d'une OPPM polarisée circulairement

2 Pour bien comprendre ce qui suit se reporter au poly pp 158-164.

Annexe : Produits tensoriel d'espaces de Hilbert

1. Définition du produit tensoriel d'espaces de Hilbert

Pour définir généralement la notion de produit tensoriel d'espaces de Hilbert, considérons deux espaces de Hilbert E et F . On peut leur associer un troisième espace de Hilbert G et une application bilinéaire T du produit direct $E \times F$ dans G tels que :

- $T(E \times F)$ engendre G , c'est-à-dire que tout élément de G est somme (éventuellement infinie) d'éléments de la forme $T(|u\rangle, |v\rangle)$.
- Soit une base hilbertienne $\{|e_m\rangle\}$ de E et une base hilbertienne $\{|f_n\rangle\}$ de F . Alors la famille $\{T(|e_m\rangle, |f_n\rangle)\}$ est une base de G .

L'espace G est appelé produit tensoriel de E et F et noté $G = E \otimes F$. On pose $T(|u\rangle, |v\rangle) = |u\rangle \otimes |v\rangle$. Les éléments de $E \otimes F$ sont appelés tenseurs; ils ont, en vertu de ce qui précède, la forme générale :

$$|\phi\rangle = \sum_{m,n} C_{m,n} |e_m\rangle \otimes |f_n\rangle$$

Les éléments de la forme $|u\rangle \otimes |v\rangle$ sont dits *factorisés*. Tout tenseur s'écrit de façon non unique comme somme (éventuellement infinie) de tenseurs factorisés.

2. Espaces de Hilbert et degrés de liberté

Pour définir l'espace de Hilbert dans lequel on peut décrire complètement l'état d'un système quantique, introduisons la notion de degré de liberté d'un système. Une particule en mouvement dans l'espace a trois degrés de liberté. Un système de deux particules en mouvement dans l'espace a donc six degrés de liberté, etc. Une particule quantique peut également avoir un moment cinétique intrinsèque (son spin, i.e. son état de polarisation pour un photon), ce qui lui confère un degré de liberté supplémentaire.

Chaque degré de liberté est décrit dans un espace de Hilbert donné. Par exemple, le mouvement suivant x se décrit dans l'espace des fonctions de carré sommable de la variable x , $L^2(\mathbb{R})$. On postule qu'un système donné comportant N degrés de liberté est décrit dans l'espace de Hilbert E produit tensoriel des espaces de Hilbert respectifs E_i , $i=1,2,\dots,N$ dans lesquels sont décrits ces N degrés de liberté : $E = E_1 \otimes E_2 \otimes \dots \otimes E_N$.

3. Propriétés du produit tensoriel

- a) Si E et F sont de dimension finie N_E et N_F , la dimension de $G = E \otimes F$ est $N_G = N_E N_F$.
- b) Lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté, il est commode d'utiliser les notations compactes : $|u\rangle \otimes |v\rangle = |u\rangle |v\rangle = |u, v\rangle$.
- c) Le produit scalaire hermitien de deux kets factorisés $|\phi\rangle = |u\rangle \otimes |v\rangle$ et $|\chi\rangle = |u'\rangle \otimes |v'\rangle$ se factorise et vaut : $\langle \chi | \phi \rangle = \langle u' | u \rangle \langle v' | v \rangle$.

4. Opérateurs dans l'espace produit tensoriel

Considérons maintenant deux opérateurs A_E et B_F agissant respectivement dans E et F . On peut définir le produit tensoriel des opérateurs A_E et B_F : $C_G = A_E \otimes B_F$ par la règle :

$$(A_E \otimes B_F)(|u\rangle \otimes |v\rangle) = (A_E |u\rangle) \otimes (B_F |v\rangle)$$

Cela permet de définir l'action de C_G sur les éléments de la base factorisée $\{|m\rangle \otimes |n\rangle\}$ et

par conséquent sur tout vecteur de $\mathbf{G} = \mathbf{E} \otimes \mathbf{F}$.

En particulier, nous pouvons *prolonger* l'opérateur A_E dans \mathbf{G} par $A_E = A_E \otimes \mathbf{I}_F$, où \mathbf{I}_F est l'opérateur identité dans \mathbf{F} .

Pour calculer l'expression matricielle du produit tensoriel de deux matrices 2x2, on utilise le produit de Kroneker :

si les opérateurs s'expriment :

$$A_E = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \text{ dans } \{|e_1\rangle, |e_2\rangle\} ,$$

$$B_F = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \text{ dans } \{|f_1\rangle, |f_2\rangle\} ,$$

$$\text{alors } A_E \otimes B_F = \begin{pmatrix} aB_F & bB_F \\ cB_F & dB_F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\alpha & a\beta & b\alpha & b\beta \\ a\gamma & a\delta & b\gamma & b\delta \\ c\gamma & c\beta & d\alpha & d\beta \\ c\gamma & c\delta & d\gamma & d\delta \end{pmatrix} \text{ dans } \{|e_1 f_1\rangle, |e_1 f_2\rangle, |e_2 f_1\rangle, |e_2 f_2\rangle\} .$$

5. Exemple simple : boîte cubique

Dans l'étude quantique d'une particule dans une boîte cubique tri-dimensionnelle de côté L , il est commode de séparer le mouvement de la particule suivant x , y , z et de chercher les solutions particulières de la forme :

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \psi_{n_1} \psi_{n_2} \psi_{n_3} \propto \sin(n_1 \pi x/L) \sin(n_2 \pi y/L) \sin(n_3 \pi z/L) .$$

Dans la terminologie du produit tensoriel, ce sont des tenseurs décomposables. Une fonction d'onde générale peut alors s'écrire en fonction de cette base factorisée :

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n_1, n_2, n_3} C_{n_1, n_2, n_3} \psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) .$$

Des exemples plus subtils de produits tensoriels d'espaces de Hilbert concernent les cas de particules ayant des degrés de liberté internes, par exemple un spin.