Vers une axiomatique minimale de l'information quantique : *Schrödinger ex-nihilo*

Olivier RIOUL

LTCI, Télécom Paris, Institut Polytechnique de Paris, France

Résumé – Partant de deux simples postulats quantiques, on peut retrouver l'équation de Schrödinger qui modélise l'évolution d'un système quelconque en dimension finie. Cette équation de la physique fondamentale, qui peut sembler absconse pour la communauté du traitement du signal, n'est en effet qu'une conséquence de propriétés d'orthogonalité dans un espace de Hilbert et d'une hypothèse probabiliste sur la mesure quantique. Sa preuve mathématique utilise des versions simplifiées des théorèmes de Wigner et de Stone.

Abstract – Schrödinger's differential equation that models the evolution of any finite-dimensional quantum system, can be deduced from two simple quantum postulates. This fundamental physics equation, which may appear abstruse to the signal processing community, is in fact merely a consequence of orthogonality properties in a Hilbert space and of a few probabilistic assumptions about quantum measurement. Its mathematical derivation uses simplified proofs of Wigner's and Stone's theorems.

1 Introduction

La communauté française de traitement du signal (au sens large) s'intéresse de plus en plus au traitement et à la communication de l'information quantique. La création récente du groupe de travail sur l'information quantique (`https://quanting.org`) au sein du GDR IASIS en est une illustration. Cependant, comme il ressort des discussions autour de l'excellent cours dispensé par François CHAPEAU-BLONDEAU au sein de ce groupe de travail [2], la première marche vers le quantique semble souvent bien haute à franchir pour le chercheur habitué au classique : le quantique a ses propres notations, outils et concepts qui peuvent lui paraître déroutants, à commencer par l'idée perturbante qu'« une mesure perturbe l'état du système ».

La littérature en information quantique, y compris le formidable manuel de référence [4], commence toujours par énoncer les 4, 5 ou 6 postulats de la physique quantique comme base de travail. Mais le souvenir éventuel de cours de mécanique quantique n'est pas forcément d'un grand secours : fonction d'onde, dualité onde-corpuscule, réduction du paquet d'ondes, principe d'incertitude, équation de Schrödinger postulant l'évolution d'un système, sans parler de la mathématisation de la physique quantique avec l'analyse hilbertienne et ses opérateurs en dimension infinie... tout cela a finalement peu de chose à voir avec ce qui est le plus utile en information et calcul quantique, où les systèmes quantiques sont de dimension finie.

Le but de ce travail est de proposer une axiomatique minimale (en dimension finie), basée sur essentiellement sur deux postulats : 1° sur l'état du système dans un espace; 2° sur la mesure et son caractère probabiliste[1]. Ces postulats sont en réalité plus des définitions qui fixent un vocabulaire physique que des véritables axiomes mathématiques. Tout le reste (dans le cadre du calcul quantique et de l'information quantique) en découle naturellement. À titre d'illustration, à partir des deux postulats de base[1], on déduira mathématiquement l'*équation de Schrödinger* qui régit l'évolution d'un système isolé.

2 Deux axiomes

Axiome 1 *L'*état *d'un système physique est un vecteur d'un espace hermitien (appelé* espace d'états*).*

Un système est donc caractérisé par la donné d'un espace hermitien (= espace de Hilbert en dimension finie) $\mathcal{H}$, espace vectoriel sur $\mathbb{C}$ dont la dimension d est appelée *dimension du système*, qui contient tous les états possibles de ce système . Le "principe de superposition" en physique quantique traduit simplement la linéarité de l'espace.

La notation de Dirac[2] permet de noter une base orthonormée (b.o.n.), appelée « base computationnelle », uniquement avec les indices[3] : $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |d\rangle$, un état est donc une superposition linéaire $|\varphi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \cdots + c_d|d\rangle$ avec des coefficients complexes $c_k = \langle k|\varphi\rangle$.

Axiome 2 *On ne peut connaitre une information sur l'état $|\varphi\rangle$ d'un système que par une* mesure*. Un procédé de mesure donné change aléatoirement $|\varphi\rangle$ en un parmi plusieurs états possibles $|\psi\rangle$ après la mesure, où la probabilité de transition (« réduction ») $|\varphi\rangle \mapsto |\psi\rangle$ vaut*

$$\mathbb{P}(|\varphi\rangle \to |\psi\rangle) = \Big(\frac{|\langle\varphi|\psi\rangle|}{\|\varphi\|\|\psi\|}\Big)^2. \tag{1}$$

Ainsi, toute mesure possède un caractère aléatoire en changeant instantanément l'état d'un système. L'expression de la probabilité (1) peut s'interpréter comme un « coefficient de détermination » (carré d'un coefficient de corrélation) entre les deux états; comme toute probabilité, elle est évidemment comprise entre 0 et 1 par l'inégalité de Cauchy-Schwarz. Outre

[1] Auxquels on pourrait rajouter une hypothèse de stationnarité d'évolution introduite au § 3.

[2] « ket » $|\psi\rangle$ et « bra » $\langle\varphi|$, produit scalaire « bra(c)ket » $\langle\varphi|\psi\rangle$ linéaire à droite et antilinéaire à gauche.

[3] On indice parfois la b.o.n. à partir de 0 : $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |d-1\rangle$ comme dans le cas $d = 2$ où l'état d'un système (appelé *qubit* pour *quantum bit*) est de la forme générale $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ($\alpha, \beta \in \mathbb{C}$).

la symétrie $\mathbb{P}(|\varphi\rangle \to |\psi\rangle) = \mathbb{P}(|\psi\rangle \to |\varphi\rangle)$ (un état peut se réduire à un autre avec la même probabilité que cet autre peut se réduire au premier), cette expression est particulièrement satisfaisante en ce qu'elle implique des propriétés importantes :
• **Non nullité** : Il est impossible qu'un état soit égal à 0 (l'origine de l'espace) car cela impliquerait que la probabilité associée à une mesure vers un état quelconque est toujours nulle[4].
• **Normalisation et choix de phase** : Deux états $|\varphi\rangle$ proportionnels $\alpha|\varphi\rangle$, où $\alpha \neq 0$, conduisent à la même expression (1) puisque le α se simplifie : $\frac{|\alpha\langle\varphi|\psi\rangle|}{\|\alpha\varphi\|} = \frac{|\alpha|}{|\alpha|}\frac{|\langle\varphi|\psi\rangle|}{\|\varphi\|} = \frac{|\langle\varphi|\psi\rangle|}{\|\varphi\|}$. Comme on ne peut connaitre une information sur l'état que par une mesure, $|\varphi\rangle$ et $\alpha|\varphi\rangle$ sont toujours indistinguables et doivent être considérés comme le *même* état[5]. Pour $\alpha > 0$, on pourra toujours *normaliser* en considérant l'état $\frac{|\varphi\rangle}{\|\varphi\|}$ au lieu de $|\varphi\rangle$ (même si ce n'est pas obligatoire dans les calculs).

De plus, le coefficient $\alpha \neq 0$ peut être complexe, ce qui fait qu'un état ne peut également être connu qu'à une phase près : on pourra toujours choisir le phase comme on veut en considérant l'état $e^{i\theta}|\varphi\rangle$ au lieu de $|\varphi\rangle$ pour un angle θ quelconque.
• **Orthogonalité des états correspondant à une mesure** : Une fois la mesure faite et l'état changé en $|\psi\rangle$, reproduire la même mesure donnera à nouveau l'état $|\psi\rangle$ avec une probabilité $\mathbb{P}(|\psi\rangle \to |\psi\rangle) = \left(\frac{|\langle\psi|\psi\rangle|}{\|\psi\|\|\psi\|}\right)^2 = 1$. Par conséquent, cette mesure ne peut amener à un *autre* état $|\psi'\rangle$ qu'avec une probabilité nulle : $0 = \mathbb{P}(|\psi\rangle \to |\psi\rangle') = \left(\frac{|\langle\psi|\psi'\rangle|}{\|\psi\|\|\psi'\|}\right)^2$, d'où on déduit $\langle\psi|\psi'\rangle = 0$: deux états différents (du point de vue de la mesure) sont nécessairement *orthogonaux*[6]. Comme il y a au maximum d états orthogonaux dans un espace de dimension d, le nombre de possibilités distinctes lors d'une mesure ne peut dépasser la dimension du système[6].
• **Projection et règle de Born** : En notant $\Pi_\psi|\varphi\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\|\psi\|}\langle\frac{\psi}{\|\psi\|}|\varphi\rangle = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\|\psi\|^2}|\varphi\rangle$ le projeté orthogonal de l'état $|\varphi\rangle$ sur la droite $\mathrm{Vect}(|\psi\rangle)$, on obtient la « règle de Born » :

$$\mathbb{P}(|\varphi\rangle \to |\psi\rangle) = \frac{\|\Pi_\psi\varphi\|^2}{\|\varphi\|^2} \tag{2}$$

qui indique que la probabilité est proportionnelle au carré de la norme du projeté sur $|\psi\rangle$, avec la normalisation adéquate (pour $|\varphi\rangle$ normé on a simplement $\mathbb{P}(|\varphi\rangle \to |\psi\rangle) = \|\Pi_\psi\varphi\|^2$).

Plus généralement, pour deux états orthogonaux $|\psi\rangle, |\psi'\rangle$, la probabilité d'une transition vers $|\psi\rangle$ *ou* $|\psi'\rangle$ est la somme des probabilités $\mathbb{P}(|\varphi\rangle \to |\psi\rangle) + \mathbb{P}(|\varphi\rangle \to |\psi\rangle')$ qui vaut

$$\frac{\|\Pi_\psi\varphi\|^2}{\|\varphi\|^2} + \frac{\|\Pi_{\psi'}\varphi\|^2}{\|\varphi\|^2} = \frac{\|\Pi_{\psi,\psi'}\varphi\|^2}{\|\varphi\|^2} \tag{3}$$

par le théorème de Pythagore, où $\Pi_{\psi,\psi'}|\varphi\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\|\psi\|}\langle\frac{\psi}{\|\psi\|}|\varphi\rangle + \frac{|\psi\rangle'}{\|\psi'\|}\langle\frac{\psi'}{\|\psi'\|}|\varphi\rangle = \left(\frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\|\psi\|^2} + \frac{|\psi'\rangle\langle\psi'|}{\|\psi'\|^2}\right)|\varphi\rangle$ n'est autre que le projeté orthogonal de l'état $|\varphi\rangle$ sur le sous-espace $\mathrm{Vect}(|\psi\rangle, |\psi'\rangle)$ engendré par les états orthogonaux $|\psi\rangle, |\psi'\rangle$. Si $d > 2$ ceci se généralise à plus de deux états orthogonaux. Ainsi, le carré dans l'expression (1) est justifié, afin que les probabilités d'événements disjoints s'ajoutent grâce au théorème de Pythagore.

Si on considère en particulier d états orthonormés $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_d\rangle$ possibles après mesure, la décomposition d'un état quelconque $|\varphi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \cdots + c_d|\psi_d\rangle$ sur cette b.o.n. donne la règle de Born

$$\mathbb{P}_k = \frac{|c_k|^2}{|c_1|^2 + |c_2|^2 + \cdots + |c_d|^2} = \frac{\|\Pi_k\varphi\|^2}{\|\varphi\|^2} \tag{4}$$

pour la probabilité de transition vers $|\psi_k\rangle$ lors de la mesure, où $\Pi_k = |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$. La somme totale des probabilités vaut $\sum_k \mathbb{P}_k = 1$ comme il se doit[7].

3 Évolution d'un système isolé

3.1 Théorème de Wigner

Considérons l'évolution des états possibles d'un système isolé (sans interaction avec un environnement) au fur et à mesure du temps. Au bout d'un certain temps même très court, chaque état possible subit une évolution

$$\begin{aligned} \mathcal{E} :& \mathcal{H} \to \mathcal{H} \\ & |\varphi\rangle \mapsto |\varphi\rangle' \end{aligned} \tag{5}$$

(par commodité on notera indifféremment $|\varphi\rangle'$ ou $|\varphi'\rangle$). On peut toujours normaliser ces états de sorte que $\|\varphi'\| = \|\varphi\|$ pour tout $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, ce qu'on supposera désormais.

On suppose que les propriétés d'une mesure sont stationnaires (pour un appareil de mesure donné), de sorte que la probabilité $\mathbb{P}(|\varphi\rangle \to |\psi\rangle) = \mathbb{P}(|\psi\rangle \to |\varphi\rangle)$ donnée par (1) se conserve lors de l'évolution : $\mathbb{P}(|\varphi\rangle \to |\psi\rangle) = \mathbb{P}(|\varphi\rangle' \to |\psi\rangle')$ pour tous états $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$. Comme $\|\varphi'\| = \|\varphi\|$ et $\|\psi'\| = \|\psi\|$, cela revient à dire que pour tous $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$,

$$|\langle\varphi|\psi\rangle| = |\langle\varphi'|\psi'\rangle|. \tag{6}$$

Chaque état de la base computationnelle $|k\rangle$ subit également la transformation $|k\rangle \mapsto |k\rangle'$, avec $|\langle k'|\ell'\rangle| = |\langle k|\ell\rangle| = \delta_{k,\ell}$. Par conséquent, les $|k'\rangle$ forment également une b.o.n. et si l'on écrit les coordonnées de $|\varphi\rangle$ et $|\varphi\rangle'$:

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \cdots + c_d|d\rangle \\ |\varphi\rangle' &= c_1'|1\rangle' + c_2'|2\rangle' + \cdots + c_d'|d\rangle' \end{aligned} \tag{7}$$

on a pour tout k les mêmes modules :

$$|c_k| = |\langle k|\varphi\rangle| = |\langle k'|\varphi'\rangle| = |c_k'|. \tag{8}$$

Il reste à examiner les phases de ces coefficients complexes pour déterminer précisément la nature de l'évolution $|\varphi\rangle \mapsto |\varphi\rangle'$. Rappelons qu'on peut toujours fixer l'indétermination sur $|\varphi\rangle'$ par une choix de phase approprié, en considérant $e^{i\theta}|\varphi\rangle'$ au lieu de $|\varphi\rangle'$ pour l'angle θ que l'on veut.

Théorème 1 (Wigner) *Par des choix de phase appropriés, ou bien $c_k' = c_k$ pour tout k quelque soit $|\varphi\rangle$, ou bien $c_k' = c_k^*$ pour tout k quelque soit $|\varphi\rangle$.*

Wigner [7] n'a fait qu'esquisser la preuve de son théorème, et de nombreux travaux l'ont re-démontré depuis, soit avec des arguments courts mais incomplets, soit des démonstrations longues et difficiles [1], soit par de grands détours en utilisant

[4] C'est la raison pour laquelle on note 0 est non $|0\rangle$ pour l'origine de l'espace. La notation $|0\rangle$ est parfois utilisée, en revanche, pour désigner un vecteur de base (cf. note de bas de page ci-dessus).

[5] Il revient au même d'identifier un état à un « rayon » $\mathrm{Vect}(|\varphi\rangle)$ de l'espace $\mathcal{H}$.

[6] Cette contrainte pourra être levée lors d'une mesure généralisée d'un système en interaction avec un environnement.

[7] On peut ainsi aboutir à la notion générale de mesure projective « de von Neumann » et introduire la notion (relativement secondaire) de résultat de mesure par la définition d'une *observable*.

des hypothèses de bijectivité ou de régularité [3]. La preuve ci-après semble nouvelle ; elle se base sur des propriétés géométriques élémentaires des coefficients $c_k \in \mathbb{C}$, vus comme des points du plan euclidien identifié à $\mathbb{C}$.

Dans toute la suite, $|k\rangle, |\ell\rangle$ (pour k, ℓ entiers) désignent des vecteurs de la base orthonormée. Commençons par démontrer quelques cas particuliers où les c_k sont réels et où on aura donc $c'_k = c_k = c^*_k$.

Exemple 1 *Par un choix de phase approprié des états $|k\rangle'$, on a pour tout $k \neq 1$,*

$$(|k\rangle - |1\rangle)' = |k\rangle' - |1\rangle'. \tag{9}$$

En effet on sait que $(|k\rangle - |1\rangle)' = c|k\rangle' - d|1\rangle'$ où $|c| = |d| = 1$, et on peut choisir la phase de $|1\rangle'$ pour que $d = 1$ et la phase de $|k\rangle'$ pour que $c = 1$. ■

Exemple 2 *En dimension $d > 2$, si $k, \ell, 1$ sont distincts, on a par un choix de phase approprié*

$$(|k\rangle + |\ell\rangle - |1\rangle)' = |k\rangle' + |\ell\rangle' - |1\rangle'. \tag{10}$$

En effet, on peut choisir la phase de $(|k\rangle + |\ell\rangle - |1\rangle)'$ pour que $(|k\rangle + |\ell\rangle - |1\rangle)' = c|k\rangle' + d|\ell\rangle' - |1\rangle'$ où $|c| = |d| = 1$. Appliquons alors la condition (6) à $|\varphi\rangle = |k\rangle + |\ell\rangle - |1\rangle$ et à $|\psi\rangle = |k\rangle - |1\rangle$ (voir exemple précédent). Puisque $\langle\psi|\varphi\rangle = 2$ et $\langle\psi'|\varphi'\rangle = c + 1$ il vient $|c + 1| = 2$. Mais le seul point situé dans le plan complexe à l'intersection des deux cercles d'équations $|c| = 1$ et $|c + 1| = 2$ est $c = 1$.

On prouve de même que $d = 1$ en considérant $|\varphi\rangle = |\ell\rangle - |1\rangle$ à la place de $|k\rangle - |1\rangle$. ■

Exemple 3 *(Généralisation de l'exemple 1). Par un choix de phase approprié pour tout $k > \ell$,*

$$(|k\rangle - |\ell\rangle)' = |k\rangle' - |\ell\rangle'. \tag{11}$$

En effet, si $d > 2$ on peut supposer $\ell > 1$, on peut choisir la phase de $(|k\rangle - |\ell\rangle)'$ pour que $(|k\rangle - |\ell\rangle)' = |k\rangle' - c|\ell\rangle'$ où $|c| = 1$. Appliquons (6) à $|\varphi\rangle = |k\rangle - |\ell\rangle$ et à $|\psi\rangle = |k\rangle + |\ell\rangle - |1\rangle$ (voir exemple précédent). Puisque $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$ et $\langle\psi'|\varphi'\rangle = 1 - c$ il vient $|1 - c| = 0$ d'où $c = 1$. ■

De ce dernier exemple élémentaire on déduit :

Corollaire 1 *Pour tout $|\varphi\rangle \mapsto |\varphi\rangle'$, on a pour tous k, ℓ,*

$$|c_k - c_\ell| = |c'_k - c'_\ell|. \tag{12}$$

Preuve: On peut supposer $k > \ell$. Appliquons (6) à $|\psi\rangle = |k\rangle - |\ell\rangle$ (voir exemple précédent). Puisque $\langle\psi|\varphi\rangle = c_k - c_\ell$ et $\langle\psi'|\varphi'\rangle = c'_k - c'_\ell$ on en déduit (12). ■

Pour la suite, on a besoin d'une petite propriété géométrique du plan :

Lemme 1 *Un point c du plan est entièrement déterminé par la donnée de ses distances $|c - c_k|$ à (au moins) 3 points c_k donnés non alignés. En outre, c est déterminé par la donnée de ses distances à (au moins) 2 points distincts c_k* alignés, *à une réflexion (symétrie axiale) près par rapport à la droite passant par ces points.*

Preuve: L'ensemble des points à égale distance de deux points distincts $c \neq c'$ est la droite médiatrice de ces deux points. Il n'y a donc indétermination sur c que lorsque les points c_k sont alignés, auquel cas c et c' sont symétriques par rapport à cette médiatrice qui passe par les c_k. ■

Corollaire 2 *Pour tout $|\varphi\rangle \mapsto |\varphi\rangle'$, par un choix de phase approprié sur $|\varphi\rangle'$, on aura soit $c'_k = c_k$ pour tout k, soit $c'_k = c^*_k$ pour tout k.*

Preuve: Supposons données toutes les distances entre les $d+1$ points $0, c_1, c_2, \ldots, c_d$, à savoir $|c_k| = |c_k - 0|$ et $|c_k - c_\ell|$ pour tous k, ℓ, et fixons le premier point non nul, disons c_1 pour fixer les idées. On applique le lemme précédent aux points restants $c_2, \ldots, c_d$. Si tous les points sont alignés, les distances $|c_k - 0|$ et $|c_k - c_1|$ déterminent entièrement ces points restants. Sinon, le premier point c_k qui n'est pas sur la droite $0\,c_1$ a deux positions possibles symétriques par rapport à cette droite. Tous les autres points sont alors déterminés de manière unique par leurs distances à ces trois points non alignés $0, c_1, c_k$. En résumé, tous les points $c_2, \ldots, c_d$ seront toujours déterminés, à une réflexion éventuelle près par rapport à la droite $0\,c_1$.

S'il n'y a pas de réflexion, puisque $|c'_1| = |c_1|$ on peut toujours choisir l'angle de rotation θ pour que $c'_1 = c_1$. Alors (8) et (12) impliquent $c'_k = c_k$ pour tout k par unicité. Si au contraire il y a réflexion, on choisit au départ l'angle de rotation θ pour que $c'_1 = c^*_1$. Dans ce cas, les points c_k réfléchis deviennent après cette rotation $c'_k = c^*_k$ pour tout k. ■

Pour conclure la preuve du théorème de Wigner, il reste à montrer que le même cas de figure (parmi les deux cas $c'_k = c_k$ ou $c'_k = c^*_k$) vaut pour *tous* les états $|\varphi\rangle$. Il n'y a rien à démontrer lorsque les $d + 1$ points $0, c_1, c_2, \ldots, c_d$ sont alignés, car on peut toujours choisir la phase de sorte que $c'_k = c_k$ pour tout k ou bien de sorte que $c'_k = c^*_k$ pour tout k. Sinon, on est dans le cas suivant :

Corollaire 3 *Supposons qu'il existe $k > \ell$ tels que $0, c_k, c_\ell$ soit non alignés. Si*[8]

$$(|k\rangle - i|\ell\rangle)' = |k\rangle' - i|\ell\rangle' \tag{13}$$

alors $c'_j = c_j$ pour tout j. Si au contraire

$$(|k\rangle - i|\ell\rangle)' = |k\rangle' + i|\ell\rangle' \tag{14}$$

alors $c'_j = c^*_j$ pour tout j.

Preuve: Puisque $0, c_k, c_\ell$ ne sont pas alignés, c_k et c_ℓ sont non nuls et $\alpha = c_k/c_\ell \notin \mathbb{R}$. Appliquons (6) à $|\varphi\rangle$ et $|\psi\rangle = |k\rangle - i|\ell\rangle$. Alors $\langle\psi|\varphi\rangle = c_k + ic_\ell$ et sous l'hypothèse (13) on a deux cas possibles pour $\langle\psi'|\varphi'\rangle = c_k + ic_\ell$ ou $c^*_k + ic^*_\ell$. Mais le deuxième cas implique $|c_k + ic_\ell| = |c_k - ic_\ell|$, d'où $|\alpha + i|^2 = |\alpha - i|^2 \implies \operatorname{Im}\alpha + 1 = 1 - \operatorname{Im}\alpha \implies \alpha \in \mathbb{R}$, ce qui contredit le fait que $0, c_k, c_\ell$ ne sont pas alignés. Le deuxième cas est donc impossible et on a $c'_j = c_j$ pour tout j. De même sous l'autre hypothèse (14) c'est le premier cas qui est impossible, d'où $c'_j = c^*_j$ pour tout j. ■

Pour finir, les valeurs particulières de k et ℓ dans le corollaire précédent n'importent pas, car on peut toujours trouver un état tel que $0, c_k, c_\ell$ ne soient pas alignés pour tous k, ℓ. On a donc soit (13) pour tous k, ℓ, soit (14) pour tous k, ℓ. Dans le premier cas $c'_j = c_j$ pour tout j quelque soit $|\varphi\rangle$, et dans le deuxième $c'_j = c^*_j$ pour tout j quelque soit $|\varphi\rangle$. Ceci termine la preuve du théorème de Wigner. ■

3.2 Principe d'évolution unitaire

Théorème 2 *Toute évolution* (5) *stationnaire et continue dans le temps d'un système quantique isolé correspond à un opérateur unitaire U tel que $|\varphi\rangle' = U|\varphi\rangle$ pour tout état φ.*

[8] $i^2 = -1$.

Pour faire apparaître le temps on pourra noter $|\varphi_0\rangle = |\varphi\rangle$ à l'origine des temps et, au bout d'un temps t, $|\varphi_t\rangle = |\varphi\rangle'$. Le principe d'évolution unitaire s'écrit alors

$$|\varphi_t\rangle = U_t|\varphi_0\rangle \tag{15}$$

où l'opérateur unitaire U_t dépend du temps t.
Preuve: Le théorème de Wigner donne deux possibilités : dans le premier cas, l'évolution $|\varphi\rangle \mapsto |\varphi\rangle'$ a pour effet de changer de b.o.n. ($|k\rangle \mapsto |k\rangle'$) en laissant les coefficients inchangés. Cette transformation est linéaire et préserve le produit scalaire : $\langle\varphi'|\psi'\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle$, c'est donc l'action d'un opérateur *unitaire* U.

Le deuxième cas du théorème de Wigner conjugue en outre les coefficients sur la base. C'est l'action d'un opérateur antilinéaire $\bar{U}$ qui conjugue le produit scalaire $\langle\varphi'|\psi'\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*$, qu'on appelle *anti-unitaire*. Supposons qu'on soit dans le deuxième cas pour toute évolution continue d'un système dans le temps et considérons les instants 0, t et $t+\tau$. On a alors par stationnarité $|\varphi_{t+\tau}\rangle = \bar{U}_{t+\tau}|\varphi_0\rangle = \bar{U}_t|\varphi_\tau\rangle = \bar{U}_t\bar{U}_\tau|\varphi_0\rangle$ pour tout $|\varphi\rangle_0$, d'où $\bar{U}_{t+\tau} = \bar{U}_t\bar{U}_\tau$. Mais il est clair que le produit de deux opérateurs anti-unitaires est à nouveau *unitaire*, ce qui contredit cette identité. On est donc nécessairement dans le premier cas : $|\varphi\rangle' = U|\varphi\rangle$ où U est unitaire. ■

3.3 Théorème de Stone

Théorème 3 (Stone) *Il existe un opérateur hermitien Ω tel que*

$$U_t = \exp(-i\Omega t) \tag{16}$$

Stone [5] et von Neumann [6] ont démontré ce résultat dans un cadre général hilbertien. La preuve suivante est en comparaison très simple.
Preuve: Pour toute évolution d'un système quantique donné dans le temps, considérons les instants 0, $t \geqslant 0$ et $t+\tau \geqslant t$. On a alors par stationnarité $|\varphi_{t+\tau}\rangle = U_{t+\tau}|\varphi_0\rangle = U_t|\varphi_\tau\rangle = U_tU_\tau|\varphi_0\rangle$ pour tout $|\varphi\rangle_0$, d'où la propriété de groupe unitaire

$$U_{t+\tau} = U_tU_\tau. \tag{17}$$

pour tous $t, \tau \geqslant 0$. Comme les opérateurs U_t sont unitaires et commutent entre eux : $U_tU_\tau = U_{t+\tau} = U_\tau U_t$, ils sont simultanément diagonalisables dans une b.o.n. $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_d\rangle$ avec des valeurs propres $\chi_k(t)$ de module $|\chi_k(t)| = 1$:

$$U_t = \sum_k \chi_k(t)|u_k\rangle\langle u_k|. \tag{18}$$

(où seules les valeurs propres dépendent du temps). La relation (17) se réécrit sur les valeurs propres :

$$\chi_k(t+\tau) = \chi_k(t)\chi_k(\tau) \tag{19}$$

et il vient en intégrant[9] sur $\tau \in [a,b]$:

$$\int_a^b \chi_k(t+\tau)\,\mathrm{d}\tau = \chi_k(t)\int_a^b \chi_k(\tau)\,\mathrm{d}\tau \tag{20}$$

d'où en notant $c = \int_a^b \chi_k(\tau)\,\mathrm{d}\tau$ qui est non nul si $a<b$ sont bien choisis,

$$\chi_k(t) = \frac{1}{c}\int_{a+t}^{b+t} \chi_k(u)\,\mathrm{d}u. \tag{21}$$

[9]De façon plus précise, on suppose que $t \mapsto \chi_k(t)$ est mesurable, donc intégrable sur un compact car bornée : $|\chi_k(t)| = 1$.

Il en résulte que le $\chi_k(t)$ est continue en t puisque $\chi_k(u)$ est intégrable, puis que $\chi_k(t)$ est dérivable en t puisque $\chi_k(u)$ est continu. En dérivant on obtient :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi_k(t) = \frac{\chi_k(b+t)-\chi_k(a+t)}{c} = \frac{\chi_k(b)-\chi_k(a)}{c}\chi_k(t) \tag{22}$$

de la forme $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi_k(t) = -i\omega_k\chi_k(t)$ où ω_k est une constante. La résolution de cette équation différentielle linéaire du premier ordre donne

$$\chi_k(t) = \alpha \cdot e^{-i\omega_k t} \tag{23}$$

où la constante α vaut $\alpha = \chi_k(0) = 1$ puisque $U_0 = I$ (identité), et où ω_k est nécessairement réel puisque les valeurs propres de U_t vérifient $|\chi_k(t)| = |e^{-i\omega_k t}| = e^{\mathrm{Im}\,\omega_k t} = 1$ pour tout t. Ainsi

$$U_t = \sum_k e^{-i\omega_k t}|u_k\rangle\langle u_k| = \exp(-i\Omega t) \tag{24}$$

où $\Omega = \sum_k \omega_k |u_k\rangle\langle u_k|$ est hermitien car ses valeurs propres ω_k sont réelles. ■

Ici les ω_k sont des pulsations qui s'expriment en radians, on peut considérer à la place les fréquences $\nu_k = 2\pi\omega_k$ en herz, et les énergies associées $E_k = h\nu_k = \hbar\omega_k$ en joules (où h est la constante de Planck et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$) qui sont les valeurs propres de l'Hamiltonien H (qui est ici invariant dans le temps pour une évolution stationnaire). En redérivant la relation (15) avec (16) sur les composantes de la b.o.n. $|u_k\rangle$, on obtient $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle u_k|\varphi_t\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle u_k|U_t|\varphi_0\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{-i\omega_k t}\langle u_k|\varphi_0\rangle = -i\omega_k\langle u_k|\varphi_t\rangle$, d'où en multipliant par $i\hbar$:

Corollaire 4 (Équation de Schrödinger)

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi_t\rangle = H|\varphi_t\rangle \tag{25}$$

où $H = \hbar\,\Omega$ est l'hamiltonien du système.

4 Conclusion

Ce travail a démontré que l'équation différentielle de Schrödinger pour un système quantique isolé n'est finalement qu'une conséquence logique de postulats très simples. La question de généraliser une telle approche pour des hamiltoniens $H(t)$ qui évoluent au cours du temps reste ouverte.

Références

[1] Valentine BARGMANN : Note on Wigner's theorem on symmetry operations. *J. Math. Phys.*, 5(7):862–868, July 1964.

[2] François CHAPEAU-BLONDEAU : Cours - Information quantique et calcul quantique. *In Groupe de travail Quantum Information Group du GDR CNRS IASIS*, 2024-2025.

[3] Amaury MOUCHET : An alternative proof of Wigner theorem on quantum transformations based on elementary complex analysis. *Physics Letters A*, 377:2709–2711, 2013.

[4] Michael A. NIELSEN et Isaac L. CHUANG : *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.

[5] Marshall Harvey STONE : On one-parameter unitary groups in Hilbert space. *Annals of Mathematics*, 33(3):643–648, 1932.

[6] John VON NEUMANN : Über einen Satz von Herrn M. H. Stone. *Annals of Mathematics, Second Series*, 33(3):567–573, 1932.

[7] Eugene Paul WIGNER : *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quanten mechanik der Atomspektren*. Friedrich Vieweg und Sohn, 1931.