

N° d'ordre : 722

50376  
1987  
57

50376  
1987  
57

# THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE FLANDRES ARTOIS

U.F.R. DE PHYSIQUE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

par

Augustin VAN GROENENDAEL



## USAGE DE L'ALGÈBRE DE LIE $su(n)$ DANS L'ÉTUDE DES SYSTEMES QUANTIQUES A $n$ ETATS

Soutenue le 11 Mai 1987 devant la Commission d'Examen

Membres du jury :

Président :	M. MACKÉ,	Professeur à l'Université de Lille I
Rapporteurs :	M. DAUDEL,	Professeur émérite, Université de Paris VI
		Membre de l'Institut
	M. JEENER,	Professeur à l'Université Libre de Bruxelles
	M. PALDUS,	Professeur à l'Université de Waterloo, Canada
	M. TILLIEU,	Professeur à l'Université de Lille I
Examineurs :	M. GRIVET,	Professeur à l'Université d'Orléans
	Mme KOSMANN- SCHWARZBACH,	
	M. WERTHEIMER,	Professeur à l'Université de Lille I
		Professeur émérite, Université de Lille I



*A mes parents*

Le travail présenté dans cette thèse a été effectué à l'U.F.R. de Physique dans le Laboratoire de Physique Théorique sous la direction de Monsieur le Professeur J. TILLIEU. Je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude pour l'aide qu'il m'a apporté, dans les différentes phases de ce travail, grâce à l'étendue de ses connaissances dans de nombreux domaines de la Physique.

Je suis très sensible à l'honneur que me font Monsieur le Professeur R. DAUDEL, membre de l'Institut, Monsieur J. JEENER, Professeur à l'Université Libre de Bruxelles et Monsieur J. PALDUS, Professeur à l'Université de Waterloo, Canada, en acceptant d'être rapporteurs de ce travail.

Je remercie Monsieur le Professeur B. MACKE de me faire l'honneur de présider ce jury.

Je remercie également Monsieur le Professeur J. Ph. GRIVET, Madame le Professeur Y. KOSMANN-SCHWARZBACH et Monsieur le Professeur R. WERTHEIMER d'avoir accepté de juger ce travail.

Mes remerciements vont aussi à tous les membres du Laboratoire.

Je remercie enfin Madame BOEREZ, Messieurs CAREY, FAUQUEMBERGUE et RAFFAUD qui m'ont aidé dans la réalisation matérielle de ce travail.

## SOMMAIRE

I - <u>INTRODUCTION</u> .....	1
Principales méthodes utilisées .....	3
a) Les superopérateurs .....	3
b) Les C*-algèbres .....	5
c) L'algèbre de Lie $su(n)$ .....	5
II - <u>ETUDE DES PROPRIETES INSTANTANEEES D'UN SYSTEME A n NIVEAUX</u> .....	6
ARTICLE I : Quelques conséquences générales .....	8
ARTICLE <u>IV</u> : Géométrie du domaine des vecteurs de cohérence .....	20
III - <u>ETUDE DE L'EVOLUTION HAMILTONIENNE D'UN SYSTEME</u> .....	29
a) Evolution hamiltonienne du vecteur de cohérence .....	29
ARTICLE II : Transformations de l'espace des observables, problèmes d'évolution .....	32
b) Obtention des constantes du mouvement .....	43
ARTICLE III : Définition et obtention des constantes du mouvement conjoncturelles .....	45
c) Evolution des états équivalents .....	55
NOTE : Sur l'évolution hamiltonienne des états équivalents de Jauch .....	56
IV - <u>ETUDE DES SYSTEMES COMPOSES</u> .....	59
ARTICLE V : Application aux systèmes composés .....	66
V - <u>EVOLUTION NON HAMILTONIENNE</u> .....	84
Cas $n = 2$ .....	86
ARTICLE VI : Equations linéaires d'évolution positive .....	103
VI - <u>CONCLUSION</u> .....	114
<u>APPENDICES</u> : Propriétés des tenseurs $C_{IJK}$ et $D_{IJK}$	
A : Dans une F-base quelconque .....	119
B : Dans une F-base standard .....	129
<u>BIBLIOGRAPHIE</u> .....	140

## I - INTRODUCTION

L'exposé le plus courant de la mécanique quantique consiste à décrire les états d'un système physique à l'aide des vecteurs dans un espace vectoriel complexe  $\mathcal{H}$  (dénommé alors, très souvent, "espace des états"), les grandeurs mesurables à l'aide des opérateurs hermitiques agissant sur cet espace. La valeur moyenne des mesures d'une telle grandeur  $\hat{G}$ , effectuées sur un système supposé être dans un tel état  $|\psi\rangle$ , est alors le nombre réel

$$\langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle.$$

Cette manière de procéder n'est pas bien adaptée aux situations très courantes où le système doit être décrit par un mélange statistique d'états. Une autre limitation importante du formalisme habituel est rencontrée dans l'étude des systèmes composés de deux ou plusieurs sous-systèmes. L'"espace des états" du système composé est alors le produit tensoriel des espaces des sous-systèmes ; toutefois, un état de cet espace n'est pas forcément un produit tensoriel de vecteurs, de sorte qu'il est le plus souvent impossible de définir, au sens habituel, l'"état", d'un sous-système. Le plus grave est que cette situation peut se présenter même si les sous-systèmes n'ont aucune interaction entre eux, comme l'a montré D. Bohm [BOHM,51] dans un exemple illustrant le paradoxe d'Einstein, Podolsky et Rosen. L'impossibilité pour un formalisme de définir l'état d'un système isolé est certainement un défaut important.

Le formalisme des opérateurs-densités a été introduit par Von Neumann [NEU,27] pour traiter des situations de ce type. L'espace

$\mathcal{H}$  est encore défini mais il ne peut plus être considéré comme l'espace des états du système (\*). Les grandeurs observables sont toujours représentées par les opérateurs hermitiques sur  $\mathcal{H}$ , tandis que les états du système physique sont définis de manière plus générale et représentés par les opérateurs hermitiques, définis positifs et de trace un, appelés opérateurs-densités. A un état  $\hat{\rho}$ , est attachée, pour une grandeur observable  $\hat{G}$ , la valeur moyenne donnée par :

$$\langle \hat{G} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho}\hat{G})$$

La trace est calculée sur  $\mathcal{H}$ .

Le mélange de deux états est défini par une combinaison linéaire réelle des opérateurs-densités correspondants, avec des coefficients positifs  $p_1$  et  $p_2$  qui peuvent être considérés comme les poids statistiques relatifs des deux états dans le mélange, avec  $p_1 + p_2 = 1$ . L'état d'un sous-système d'un système composé peut alors être défini, de manière générale, par un opérateur densité "réduit" obtenu grâce à une opération mathématique appelée trace partielle.

Le projecteur sur un vecteur de  $\mathcal{H}$  est un opérateur-densité particulier qu'on appelle état pur. Les états purs sont les seuls états considérés dans le formalisme courant.

La généralisation de la notion d'état d'un système quantique qui vient d'être indiquée peut permettre l'utilisation d'équations d'évolution plus générales que l'équation de Schrödinger bien connue. En effet, dans le formalisme courant de la mécanique quantique, l'évolution est décrite par un opérateur hamiltonien. L'opérateur d'évolution est alors unitaire et conserve les valeurs propres de l'opérateur densité. Par conséquent, un état pur le reste et les poids statistiques dans un mélange ne peuvent varier.

Des équations d'évolution plus générales, que nous nommerons non-hamiltoniennes, doivent aussi être envisagées, dans lesquelles, par

---

(\*) Ses vecteurs sont seulement l'une des représentations de certains états nommés "états purs".

exemple, un état pur peut devenir un mélange. Nous en étudierons certains aspects dans la suite de ce travail.

Nous limitons cette étude aux systèmes pour lesquels l'espace  $\mathcal{H}$  est de dimension finie  $n$ , ou peut être considéré comme tel, au moins à titre d'approximation. Avec Hioe et Eberly [HIOE,81], nous appellerons un tel système : système à  $n$  niveaux, parce que  $n$  est le nombre maximum de valeurs propres différentes que peut posséder une grandeur observable ; c'est aussi le nombre maximum de projecteurs orthogonaux entre eux. De tels systèmes sont fréquemment considérés dans l'étude des lasers ou de la résonance magnétique.

### PRINCIPALES METHODES UTILISEES

Pour mettre en oeuvre la description des propriétés d'un système quantique indiquée brièvement ci-dessus, description qui fait appel essentiellement à des opérateurs hermitiques agissant sur  $\mathcal{H}$  (opérateurs -densités et observables) et à la trace de leurs produits, il est intéressant de remarquer que l'ensemble des opérateurs hermitiques sur  $\mathcal{H}$  forme lui-même un espace vectoriel réel (\*), sur lequel on peut définir un produit scalaire à l'aide de l'opération trace.

Cette remarque a été faite par plusieurs auteurs [FANO,57], [CRAW,58], [BAN,63], [DAV,76] et peut être considérée comme la racine de différentes méthodes. Celles-ci, énoncées le plus souvent pour des systèmes quantiques quelconques, prennent évidemment une forme plus simple et plus facile à appliquer, lorsqu'on se limite au cas des systèmes à  $n$  niveaux.

a) On peut citer, en premier lieu, la méthode des SUPEROPERATEURS. Ceux-ci ont été introduits par J.A. Crawford [CRAW,58], leur usage a été développé par C.N. Banwell et H. Primas [BAN,63] sous l'appellation de METHODE DIRECTE car elle conduit directement aux

---

(\*) Dont le complexifié est formé par l'ensemble de tous les opérateurs sur  $\mathcal{H}$ .

fréquences de transition, grandeurs observées, plutôt qu'aux niveaux d'énergie.

Des exposés plus récents ont été donnés par J. Jeener [JEEN,82] et P.O. Löwdin [LOW,82]. L'espace vectoriel des opérateurs est appelé superespace et ses éléments superkets. L'opérateur  $\hat{A}$  devient donc le superket  $|\hat{A}\rangle$ . Les opérateurs sur cet espace sont nommés superopérateurs. Cette terminologie met bien en évidence l'analogie avec l'espace des kets, puisque les opérateurs-densités, représentant les états, sont désormais des superkets. Le produit scalaire défini précédemment à l'aide de la trace prend alors la forme

$$\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle = \text{tr}(\hat{A}^+ \hat{B}) = \sum_{i,j} \bar{A}_{ji} B_{ji}$$

et l'équation de Liouville quantique

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

devient

$$i\hbar \frac{\partial |\hat{\rho}\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{L}} |\hat{\rho}\rangle$$

semblable à l'équation de Schrödinger pour les kets. Le superopérateur  $\hat{\mathcal{L}}$  appelé liouvillien a pour composantes, dans une base de  $\mathcal{H}$  où les composantes sont numérotées par  $i, j, k, \ell$ ,

$$\mathcal{L}_{ij,kl} = H_{ik} \delta_{jl} - H_{lj} \delta_{ik}$$

$\hat{\mathcal{L}}$  et  $\hat{H}$  sont diagonaux en même temps ; les valeurs propres de  $\hat{\mathcal{L}}$  sont alors

$$\mathcal{L}_{ij,ij} = E_i - E_j.$$

Un avantage important de cette méthode est la possibilité de décrire des phénomènes de relaxation. Ces phénomènes sont décrits en prenant pour  $\hat{\mathcal{L}}$  un superopérateur qui ne provient pas d'un opérateur  $\hat{H}$  [RED,65].

b) Une autre voie utilise les C\*-algèbres [DAV,76] [SPO,80]. Pour un système quantique donné, la C\*-algèbre est formée par les observables, leurs combinaisons linéaires et leurs produits. Les superkets forment une telle algèbre ; toutefois, il existe en mécanique quantique d'autres possibilités de construire des C\*-algèbres. Un état est alors une application linéaire qui, à toute observable, fait correspondre un nombre réel, à toute observable positive un nombre positif et à l'identité 1. Le nombre obtenu est interprété comme la valeur moyenne de l'observable. Cette méthode présente l'avantage de ne pas faire intervenir un espace  $\mathcal{H}$ , inutile formellement, mais seulement les observables, leurs relations et leurs mesures. Elle est surtout utilisée dans les études sur les fondements de la mécanique quantique.

c) La méthode que nous nous proposons de développer ici, limitée aux systèmes à  $n$  niveaux, s'appuie sur l'introduction explicite de l'Algèbre de Lie  $su(n)$  et sur l'utilisation éventuelle des notions et théorèmes que comporte la théorie mathématique d'une telle algèbre.

Nous précisons ainsi des suggestions faites par U. Fano [FANO,57] et systématisons l'usage de  $su(n)$  effectué auparavant par divers auteurs, en particulier F.T. Hioe et J.H. Eberly [HIOE,81], [HIOE,82], [HIOE,83].

## II - ETUDE DES PROPRIETES INSTANTANEEES D'UN SYSTEME A N NIVEAUX

Nous allons d'abord nous préoccuper de l'étude des "propriétés instantanées" d'un système quantique  $S_0$  à  $n$  niveaux, c'est-à-dire de la description de l'état et des propriétés de  $S_a$  à un instant quelconque.

Dans un premier article, noté I, nous montrons comment l'algèbre de Lie  $su(n)$  apparaît dans le traitement quantique de  $S_0$ , par sa réalisation comme ensemble des opérateurs hermitiques de trace nulle agissant sur un espace vectoriel  $\mathcal{H}_n$  à  $n$  dimensions. Tout opérateur-densité et toute observable de  $S_0$  peuvent alors être écrits sous forme de combinaisons linéaires de l'opérateur unité et d'éléments de  $su(n)$ .

a) Dans cet article, c'est d'ailleurs essentiellement la structure d'espace vectoriel de  $su(n)$  qui est utilisée, espace que l'on peut doter d'une métrique euclidienne grâce à l'opération trace sur  $\mathcal{H}_n$ . On obtient ainsi un espace  $\mathcal{E}_r$ , de dimension  $r = n^2 - 1$ , que nous appelons l'espace des observables. Corrélativement, nous introduisons un espace  $\bar{\mathcal{E}}_r$ , isomorphe à  $\mathcal{E}_r$ , que nous nommons avec Hioe et Eberly espace de cohérence et qui est l'espace des vecteurs  $\vec{G}$  définis à partir des observables  $\hat{G}$  par la relation (\*)

---

(\*) Cette définition diffère un peu de celle utilisée dans les articles I et II et sera employée désormais dans la suite de cette thèse, aussi bien pour  $\hat{\rho}$  que pour une observable  $\hat{G}$ .

$$\hat{G} = \frac{1}{n} (\text{tr}(\hat{G}) \hat{I} + \sum_{J=1}^{n^2-1} G_J \hat{Q}_J) \quad (1)$$

$$= \frac{1}{n} (\text{tr}(\hat{G}) \hat{I} + \vec{G} \cdot \vec{Q}) \quad (1')$$

où les  $\hat{Q}_J$  forment une base orthonormée de  $\mathcal{E}_r$ .

b) Les notions et formules introduites permettent de résoudre facilement et clairement un problème soulevé par Band et Park [BAND], celui de la "détermination expérimentale" ou connaissance de l'état de  $S_Q$ . Cet état, qui provient d'un certain mode de préparation auquel a été soumis  $S_Q$ , peut être identifié à  $\hat{\rho}$  sous réserve qu'un seul opérateur  $\hat{\rho}$  donne des valeurs moyennes compatibles avec ce mode de préparation. Cette connaissance complète est obtenue lorsqu'on a déterminé toutes les composantes d'un vecteur de cohérence  $\vec{P}$ , associé à l'état  $\hat{\rho}$  par une définition analogue à (1'), soit

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} (\hat{I} + \vec{P} \cdot \vec{Q}) \quad (2)$$

Un tel résultat montre que l'ensemble  $\{\hat{Q}_J\}$  fournit ce que Band et Park appellent un ensemble minimal d'observables.

Remarquons que Band et Park avaient proposé de résoudre ce problème en utilisant une base particulière de  $\mathcal{E}_r$ , constituée par des observables tensorielles irréductibles (liées aux harmoniques sphériques) base à laquelle maints auteurs ont tendance à faire jouer un rôle privilégié.

Pour les situations où  $\hat{\rho}$  n'est pas parfaitement connu, Jauch a introduit de manière générale la notion d'états équivalents [JAU,64], [JAU,68]. Nous précisons cette notion dans le cas d'un système à  $n$  niveaux.

## Usage de l'Algèbre de Lie $su(n)$ dans l'Étude des Systèmes Quantiques à $n$ États. I. Quelques Conséquences Générales

JACQUES TILLIEU ET AUGUSTIN VAN GROENENDAEL

*Laboratoire de Physique Théorique, Université de Lille I, F-59655 Villeneuve d'Ascq, France*

### Abstracts

In an  $n$  level quantum system there is a relation between each density operator and an element of  $su(n)$  Lie algebra. This relation is also established between Cartan's subalgebras and the complete sets of compatible observables. A scalar product is then defined in this algebra in order to introduce orthonormal bases and to simplify many calculations about expectation values of observables. Therefore simple general rules were established which show how to determine (completely or partly), from linearly independent observables, the density operator of the system.

A chaque opérateur-densité d'un système quantique à  $n$  états correspond un élément de l'algèbre de Lie  $su(n)$ . Une correspondance est établie également entre les sous-algèbres de Cartan et les ensembles complets d'observables compatibles. Cette algèbre est ensuite munie d'un produit scalaire qui permet d'y introduire des bases orthonormées et de simplifier, en conséquence, nombre de calculs portant sur les valeurs moyennes d'observables. Nous établissons alors des règles simples et générales montrant comment il est possible, à partir d'observables linéairement indépendantes, de déterminer complètement ou partiellement l'opérateur-densité du système.

### 1. Introduction—L'Espace des Observables

a) Nous considérons un système quantique  $S_Q$  dont l'espace des états est à  $n$  dimensions, soit  $\mathcal{H}_n$  [système à  $n$  niveaux d'énergie; spin  $S = \frac{1}{2}(n-1), \dots$ ].

On sait que l'état de ce système peut être décrit par un opérateur-densité (opérateur hermitique semidéfini positif agissant sur  $\mathcal{H}_n$ , de trace unité), et que la valeur moyenne de toute observable  $\hat{G}$  est donnée par la relation

$$\langle \hat{G} \rangle = \text{Tr}(\hat{G}\hat{\rho}). \quad (1)$$

b) Tout opérateur hermitique (observable) agissant sur  $\mathcal{H}_n$  peut être écrit sous la forme

$$\hat{G} = \frac{g}{n} \hat{I} + \hat{G}' \quad (2)$$

où  $\hat{G}'$  est un opérateur hermitique de trace nulle ( $\text{Tr} \hat{G}' = 0$ ) et  $g = \text{Tr} \hat{G}$ . En particulier,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} \hat{I} + \hat{\rho}'. \quad (3)$$

( $\hat{\rho}'$  n'est pas un opérateur-densité, puisque  $\text{Tr} \hat{\rho}' = 0$ .)

Dans la suite de l'article, nous utiliserons principalement des observables de trace nulle, puisque, d'après l'Eq. (2), toute autre observable peut être obtenue comme combinaison linéaire de  $\hat{I}$  et d'observables de trace nulle.

c) On sait que l'ensemble des opérateurs hermitiques de trace nulle agissant sur  $\mathcal{H}_n$  forme une représentation par opérateurs de l'algèbre de Lie réelle  $\mathfrak{su}(n)$ , ou  $A_{n-1}$  dans la notation de Cartan.

Cette algèbre de Lie est de dimension  $r = n^2 - 1$ , et nous désignons par  $\mathcal{E}$ , l'espace vectoriel correspondant, que nous appellerons *espace des observables* (de trace nulle).

On sait également que  $\mathfrak{su}(n)$  possède une sous-algèbre abélienne de dimension  $n - 1$ , la *sous-algèbre de Cartan*, c'est-à-dire que l'on peut trouver un ensemble maximal de  $n - 1$  observables qui commutent entre elles. Cet ensemble et la sous-algèbre correspondante ne sont d'ailleurs pas définis de manière unique.

Dans cet article, nous nous proposons d'examiner, à partir des notions rapidement résumées ci-dessus, quelques questions relatives aux propriétés et usages de l'opérateur-densité.

## 2. Ensembles d'Observables Linéairement Indépendantes—Bases $F$ -Orthonormées

a) Du caractère vectoriel de  $\mathcal{E}$ , de dimension  $r = n^2 - 1$ , découle le fait, simple mais général, qu'il ne peut exister que  $n^2 - 1$  observables (de trace nulle) linéairement indépendantes (ou  $n^2$  observables de trace quelconque).

Ces  $r$  observables peuvent être utilisées pour constituer une base de  $\mathcal{E}$ , et toute autre observable pourra être exprimée comme une combinaison linéaire réelle des  $r$  éléments de la base.

b) L'existence d'une sous-algèbre de Cartan, à laquelle correspond un sous-espace vectoriel  $\mathcal{E}_{n-1}^c$ , entraîne qu'il ne peut exister que  $n - 1$  observables commutables de trace nulle linéairement indépendantes (ou  $n$  observables commutables de trace quelconque). Toute autre observable commutable pourra être exprimée comme une combinaison linéaire réelle des  $n - 1$  éléments d'une base de  $\mathcal{E}_{n-1}^c$ .

c) Si l'on considère seulement  $p (< r)$  observables linéairement indépendantes, elles forment une base pour un sous-espace vectoriel  $\mathcal{E}_p$  de  $\mathcal{E}$ . Il convient de remarquer qu'en général,  $\mathcal{E}_p$  ne possède pas la structure d'algèbre de Lie (ce qui est le cas pour  $\mathcal{E}_{n-1}^c$ ).

Ces résultats généraux peuvent être mis sous une forme plus pratique en complétant les propriétés de  $\mathcal{E}$ , par l'introduction d'une métrique. On peut définir, avec Fano [1], le produit scalaire suivant, sur l'espace des observables:

$$(\hat{G}_a, \hat{G}_b) = \text{Tr}(\hat{G}_a \hat{G}_b). \quad (4)$$

(La trace est calculée sur  $\mathcal{H}_n$ .)

On peut alors définir des opérateurs orthogonaux au sens de Fano (que nous appellerons opérateurs  $F$ -orthogonaux, pour ne pas les confondre avec les opérateurs orthogonaux au sens habituel), par la relation:

$$\text{Tr}(\hat{G}_a \hat{G}_b) = 0, \quad \hat{G}_a, \hat{G}_b \in \mathfrak{su}(n) \quad (a \neq b). \quad (5)$$

a) Grâce au produit scalaire (4), on peut introduire une base orthonormée dans l'espace des observables  $\mathcal{E}_r$ , que nous appellerons  $F$ -base, ou base  $F$ -orthonormée, soit l'ensemble:

$$\{\hat{Q}_J\}, \quad J = 1 \rightarrow r = n^2 - 1 \quad (6)$$

avec

$$\text{Tr } \hat{Q}_J = 0$$

$$\text{Tr } (\hat{Q}_J \hat{Q}_K) = \delta_{JK}.$$

Une telle base peut être construite, par le procédé d'orthogonalisation de Schmidt, à partir d'un ensemble de  $r$  observables linéairement indépendantes. Réciproquement, à partir d'une  $F$ -base on peut construire un ensemble de  $r$  observables linéairement indépendantes (voir plus loin, la notion d'ensemble minimal d'observables ou ensemble  $r$ -déterminant).

A un système orthonormé complet  $\{|v_i\rangle\}$  de  $\mathcal{H}_n$  il est possible d'associer la  $F$ -base suivante de  $\mathcal{E}_r$ , indiquée par Hioe et Eberly [2]:

$$\hat{Q}_i = \sqrt{\frac{j}{j+1}} \left\{ |v_{i+1}\rangle\langle v_{i+1}| - \frac{1}{j} \sum_{k=1}^i |v_k\rangle\langle v_k| \right\}, \quad j = 1, 2, \dots, n-1$$

$$\hat{Q}_{jk}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (|v_j\rangle\langle v_k| + |v_k\rangle\langle v_j|), \quad j \neq k$$

$$\hat{Q}_{jk}^- = -\frac{i}{\sqrt{2}} |v_j\rangle\langle v_k| + \frac{i}{\sqrt{2}} |v_k\rangle\langle v_j|, \quad j \neq k.$$

En résumé, par le procédé rappelé ci-dessus, l'espace  $\mathcal{E}_r$  est doué d'une structure d'espace euclidien.

L'ensemble des opérateurs ci-dessus forme une représentation  $n$ -dimensionnelle de  $su(n)$  qui, dans le soc  $\{|v_i\rangle\}$ , donne la représentation matricielle:

$$\{ \langle v_l | \hat{Q}_j | v_m \rangle, \langle v_l | \hat{Q}_{jk}^\pm | v_m \rangle \}.$$

Cette représentation est l'une des représentations fondamentales de cette algèbre ou du groupe de Lie correspondant  $SU(n)$ . On rappelle qu'il existe  $n-1$  représentations fondamentales qui sont toutes irréductibles [3].

b) Tout vecteur de  $\mathcal{E}_r$ , c'est-à-dire toute observable de trace nulle, peut alors être écrit sous la forme:

$$\hat{G}_a = \sum_{j=1}^r G_j^a \hat{Q}_j, \quad G_j^a \in \mathcal{R}. \quad (7)$$

On trouve facilement la "composante"  $G_j^a$  de  $\hat{G}_a$ , soit:

$$G_j^a = \text{Tr } (\hat{G}_a \hat{Q}_j). \quad (8)$$

Si les vecteurs  $|v_i\rangle$  sont les vecteurs propres d'une observable  $\hat{G}$ , on voit que celle-ci ne comporte que les opérateurs  $\hat{I}$  et  $\hat{Q}_i$  de la  $F$ -base précédente.

c) Par suite de l'existence d'une sous-algèbre de Cartan, on peut toujours trouver des  $F$ -bases dans lesquelles  $n - 1$  éléments commutent entre eux (commutation d'opérateurs agissant sur  $\mathcal{H}_n$ ).

La plupart du temps, nous supposons en conséquence que la  $F$ -base définie par la relation (6) est telle que l'on ait:

$$[\hat{Q}_J, \hat{Q}_K] = 0, \quad J, K = 1 \rightarrow n - 1 \quad (9)$$

c'est-à-dire que les  $n - 1$  premiers éléments de la base (6) forment une base pour la sous-algèbre de Cartan  $\mathcal{E}_{n-1}^c$ .

### 3. Forme Générale et Détermination "Expérimentale" d'un Opérateur-Densité

a) D'après les indications données ci-dessus, un opérateur-densité peut être écrit sous la forme générale:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} \left( \hat{I} + \sum_{j=1}^r P_j \hat{Q}_j \right) \quad (10)$$

avec

$$P_j = n \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{Q}_j). \quad (11)$$

La formule (10) peut être réécrite sous la forme plus condensée:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} (\hat{I} + \mathbf{P}\hat{\mathbf{Q}}). \quad (10')$$

$\mathbf{P}$ , vecteur dans un espace euclidien réel  $\bar{\mathcal{E}}_r$ , de dimension  $r$  (isomorphe à  $\mathcal{E}_r$ ), est appelé "vecteur de cohérence" par Hioe et Eberly [2].

La formule (10) généralise la formule bien connue pour le cas  $n = 2$ , où les  $\hat{Q}_j$  (au nombre de  $r = 3$ ) sont les matrices de Pauli (habituellement non normalisées au sens de Fano).

b) Les  $n^2 - 1$  composantes  $P_j$  sont des nombres réels, indépendants entre eux dans le cas d'un état quelconque de  $S_Q$  ("mélange statistique").

Ces nombres sont néanmoins astreints à ne varier que dans un certain domaine de valeurs, c'est-à-dire, de manière équivalente, que le vecteur  $\mathbf{P}$ , caractérisant un opérateur-densité d'après la formule (10'), doit se trouver dans un certain domaine  $D$  de  $\bar{\mathcal{E}}_r$ .

En effet, la forme (10) exprime que  $\hat{\rho}$  est hermitique et de trace unité. Il faut aussi qu'il soit semi-défini positif, c'est-à-dire que l'on ait:

$$\langle \Psi | \hat{\rho} | \Psi \rangle \geq 0, \quad \forall | \Psi \rangle \in \mathcal{H}_n. \quad (12)$$

De cette condition on déduit (voir Appendice) que l'on doit avoir la condition équivalente (produit scalaire dans  $\bar{\mathcal{E}}_r$ ):

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}^V \geq -n, \quad \forall \mathbf{P}^V \in D. \quad (13)$$

On doit également avoir la condition générale:

$$\text{Tr} (\hat{\rho}^2) \leq \text{Tr} \hat{\rho} = 1. \quad (14)$$

(L'égalité est seulement réalisée pour un état pur.)

A partir de la formule (10), on trouve facilement la condition équivalente:

$$\mathbf{P}^2 = \sum_{j=1}^r P_j^2 \leq n(n-1). \quad (15)$$

On sait qu'à un mode de préparation du système  $S_O$  (ou plutôt, en toute rigueur, d'un ensemble statistique de systèmes  $S_O$  identiques et identiquement préparés), correspond un état de  $S_O$  (mélange ou état pur) qui est décrit, défini mathématiquement, par un opérateur-densité  $\hat{\rho}$ .

a) Si l'on veut déterminer  $\hat{\rho}$  expérimentalement par des séries de mesures portant sur diverses observables, il faut arriver à obtenir les valeurs des  $r = n^2 - 1$  paramètres réels dont dépend  $\hat{\rho}$ . On peut, pour cela, mesurer les valeurs moyennes de  $r$  observables  $\hat{G}_a$  (que l'on peut supposer, sans inconvénient, de trace nulle) et utiliser les  $r$  équations:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{G}_a) = \langle \hat{G}_a \rangle_{\text{mes}}, \quad a = 1 \rightarrow r. \quad (16)$$

N'importe quel ensemble de  $r$  observables ne convient pas. En particulier, on voit facilement que  $r$  observables commutables ne conviennent pas, car elles ne fournissent que les  $n$  éléments diagonaux de  $\hat{\rho}$  (dans la base propre commune aux observables utilisées).

b) Si nous appelons *ensemble minimal* [4, 5] ou *ensemble  $r$ -déterminant* un ensemble d'observables permettant la détermination complète de  $\hat{\rho}$ , une condition nécessaire et suffisante de son existence peut facilement être obtenue en utilisant les décompositions (7) et (10). En effet, on a:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{G}_a) = \frac{1}{n} \sum_J G_J^a P_J = \frac{1}{n} \mathbf{G}^a \cdot \mathbf{P}.$$

La formule (16) fournit alors le système de  $r$  équations linéaires:

$$\sum_{J=1}^r G_J^a P_J = n \langle \hat{G}_a \rangle_{\text{mes}}, \quad a = 1 \rightarrow r \quad (17)$$

pour déterminer les  $r$  inconnues réelles  $P_J$  (on rappelle que les composantes réelles  $G_J^a$  sont connues, lorsqu'on connaît  $\hat{G}_a$ ).

La condition nécessaire et suffisante pour que le système (17) admette une solution et une seule est que l'on ait:

$$\det(G_J^a) \neq 0, \quad a, J = 1 \rightarrow r \quad (18)$$

c'est-à-dire que les  $r$  observables  $\hat{G}_a$  utilisées doivent être linéairement indépendantes (indépendance linéaire dans  $\mathcal{E}_r$ ). On peut aussi dire que les  $r$  vecteurs  $\mathbf{G}^a$  doivent être linéairement indépendants dans  $\mathcal{E}_r$ .

c) Appelons  $\Gamma_r$  un ensemble  $r$ -déterminant. D'après les indications données plus haut sur une sous-algèbre de Cartan, un ensemble  $\Gamma_r$ , ne peut comporter au plus que  $n - 1$  observables commutables ( $n$ , en incluant  $\hat{I}$ ). Il n'en comporte d'ailleurs pas obligatoirement, de même qu'une  $F$ -base de  $\mathcal{E}_r$  ne comporte pas nécessairement d'éléments commutables.

*Remarques*

1) Le traitement donné par Park et Band [5] au problème envisagé dans ce paragraphe, est un cas particulier de celui proposé ici, puisqu'il consiste à utiliser, dans  $\mathcal{E}_r$ , une base  $F$ -orthonormée particulière, constituée par les opérateurs tensoriels multipolaires irréductibles, déjà introduits par Fano et Racah [6]. Cet usage est lié à l'existence du groupe des rotations  $O(3)$  comme groupe de symétrie possible pour  $S_Q$ .

2) Un ensemble complet d'observables commutables (ECOC), notion souvent utilisée en mécanique quantique, possède une fonction différente de celle ici remplie par un ensemble  $r$ -déterminant. Un ECOC (destiné à "lever" la dégénérescence éventuelle d'une observable de  $\mathcal{H}_n$ ) possède au maximum  $n - 1$  observables commutables de trace nulle ( $n$  avec  $\hat{I}$ ); il est donc toujours insuffisant pour déterminer complètement  $\hat{\rho}$ .

*Exemple:  $n = 2$  ( $r = 3; n - 1 = 1$ )*

Dans ce cas, traité par Band et Park [4], la condition (18) devient:

$$\begin{bmatrix} G_1^a & G_2^a & G_3^a \\ G_1^b & G_2^b & G_3^b \\ G_1^c & G_2^c & G_3^c \end{bmatrix} \neq 0 \tag{19}$$

et peut être écrite sous la forme équivalente utilisant le produit mixte des trois vecteurs correspondants de  $\mathcal{E}_3$ , soit:

$$\mathbf{G}^a (\mathbf{G}^b \wedge \mathbf{G}^c) \neq 0 \tag{19'}$$

c'est-à-dire que les trois vecteurs  $\mathbf{G}^\alpha$  ( $\alpha = a, b, c$ ) ne doivent pas être coplanaires, autre manière de dire qu'ils doivent être linéairement indépendants (dans  $\mathcal{E}_3$ ).

Band et Park montrent que la condition (19') nécessite que les trois observables  $\hat{G}^\alpha$  ne commutent pas entre elles. Ce résultat découle de leur indépendance linéaire et du fait qu'une sous-algèbre de Cartan de  $\mathfrak{su}(2)$  est de dimension 1.

**4. Détermination Expérimentale Incomplète d'un Opérateur-Densité—Etats Equivalents**

Lorsque l'on dispose de mesures portant sur un nombre d'observables inférieur à  $r = n^2 - 1$ , la connaissance de l'opérateur-densité ne peut être complète.

Supposons que l'on dispose de mesures portant sur un ensemble  $\Gamma_p$  de  $p$  observables linéairement indépendantes, ensemble que nous appellerons ensemble  $p$ -déterminant.

Les équations du type (17) ne sont plus qu'au nombre de  $p$  et ne permettent donc de déterminer que  $p$  paramètres réels figurant dans  $\hat{\rho}$ , par exemple  $p$  composantes  $P_j$  de  $\hat{\rho}$ .

Il reste donc  $r - p = n^2 - 1 - p$  paramètres indéterminés dans  $\hat{\rho}$ . On peut, à partir des  $p$  observables linéairement indépendantes de  $\Gamma_p$ , construire un

ensemble  $F$ -orthonormé formant une base "partielle" de  $\mathcal{E}$ , (ou base pour un sous-espace de  $\mathcal{E}$ , de dimension  $p$ ). Cette base partielle peut toujours être complétée, à l'aide de  $r-p$  autres observables linéairement indépendantes (des  $p$  premières et entre elles), pour obtenir une  $F$ -base de  $\mathcal{E}$ , adaptée à l'existence du sous-espace  $\mathcal{E}_p$ .

Pour rendre compte de la connaissance incomplète de  $\hat{\rho}$ , Jauch [7, 8] a introduit la notion d'états équivalents par rapport à un certain ensemble  $\Gamma$  d'observables, en définissant deux opérateurs-densités  $\Gamma$ -équivalents  $\hat{\rho}_I$  et  $\hat{\rho}_{II}$  par la condition:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_I \hat{G}) = \text{Tr}(\hat{\rho}_{II} \hat{G}), \quad \forall \hat{G} \in \Gamma. \quad (20)$$

Cette définition peut être quelque peu précisée en utilisant les indications précédentes et les décompositions (7) et (10).

Pour appliquer la formule (20), nous utilisons un ensemble  $\Gamma_p$  de  $p$  observables linéairement indépendantes et nous écrivons alors, avec Jauch,

$$\hat{\rho}_I \stackrel{\Gamma_p}{\sim} \hat{\rho}_{II}. \quad (21)$$

Si l'on utilise, dans  $\mathcal{E}$ , une base  $F$ -orthonormée adaptée à l'existence de  $\mathcal{E}_p$ , les deux opérateurs-densité équivalents peuvent alors être écrits:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_I &= \frac{1}{n} \left( \hat{I} + \sum_{J=1}^p P_J \hat{Q}_J + \sum_{K=p+1}^r P_K^I \hat{Q}_K \right) \\ \hat{\rho}_{II} &= \frac{1}{n} \left( \hat{I} + \sum_{J=1}^p P_J \hat{Q}_J + \sum_{K=p+1}^r P_K^{II} \hat{Q}_K \right) \end{aligned} \quad (22)$$

avec

$$P_K^I \neq P_K^{II}. \quad (22')$$

Une classe de  $\Gamma_p$ -équivalence peut alors être caractérisée par les  $p$  composantes  $P_J$  (le jeu de celles-ci est évidemment lié au choix des observables composant  $\Gamma_p$ ). Un élément représentatif de cette classe d'équivalence peut être obtenu en prenant  $P_K = 0$  ( $K = p+1 \rightarrow r$ ) et déterminant les  $p$  autres coefficients par un système d'équations linéaires du type (17) mais d'ordre  $p$ .

Si la  $F$ -base utilisée n'est pas adaptée à l'existence du sous-espace  $\mathcal{E}_p$  correspondant à l'usage d'un certain ensemble  $p$ -déterminant  $\Gamma_p$ , la relation (20) fournit les  $p$  équations:

$$\sum_{J=1}^r G_J^a P_J^I = \sum_{J=1}^r G_J^a P_J^{II} = \langle \hat{G}_a \rangle_{\text{mes}}, \quad a = 1 \rightarrow p$$

et il est toujours possible de trouver un jeu de  $p$  paramètres communs à  $\hat{\rho}^I$  et  $\hat{\rho}^{II}$ , puisque la matrice rectangulaire  $(G_J^a)$  ( $a = 1 \rightarrow p; J = 1 \rightarrow r$ ) est supposée de rang  $p$ .

a) Si l'on introduit, dans  $\Gamma_p$ , une observable supplémentaire qui est une combinaison linéaire des  $p$  premières, on n'obtient que des informations supplémentaires redondantes et l'on doit considérer que l'ensemble  $\Gamma_p$  reste le même.

b) Par contre, en introduisant une  $(p+1)^{\text{ème}}$  observable linéairement indépendante des  $p$  premières, on passe à un ensemble  $(p+1)$ -déterminant  $\Gamma_{p+1}$ , et l'on peut écrire:

$$\Gamma_p \subset \Gamma_{p+1}. \quad (23)$$

On peut construire une chaîne d'ensembles correspondant à une détermination croissante de  $\hat{\rho}$ , soit:

$$\Gamma_0 \subset \Gamma_1 \subset \dots \subset \Gamma_p \subset \Gamma_{p+1} \subset \dots \subset \Gamma_r. \quad (24)$$

$\Gamma_0$  correspond à une absence totale d'informations sur  $\hat{\rho}$  (à l'usage de la seule observable  $\hat{I}$ ),  $\Gamma_r$  à l'information la plus complète possible sur  $\hat{\rho}$  (à l'usage de  $\hat{I}$  et de  $r$  observables linéairement indépendantes).

La chaîne (24) n'est pas unique, puisque la constitution (non unique) de  $\Gamma_p$  ne détermine que partiellement celle de  $\Gamma_{p+1}$ .

Il est facile de voir que deux opérateurs-densités  $\Gamma_p$ -équivalents sont  $\Gamma_{p-q}$ -équivalents, tandis que la réciproque n'est pas vraie.

*Remarque*

Le nombre d'observables commutables présentes dans un ensemble  $p$ -déterminant ne peut évidemment jamais dépasser  $n-1$  ( $n$  avec  $\hat{I}$ ).

**5. Remarques Finales**

Nous avons montré dans cet article que l'usage des propriétés de l'algèbre de Lie  $su(n)$  peut permettre d'obtenir des réponses simples à des questions générales posées par la description quantique d'un système pouvant exister dans  $n$  états différents.

Cet usage paraît présenter une certaine parenté avec des propositions de fonder la mécanique quantique sur des axiomatiques utilisant les structures d'algèbres à trace [9, 10] ou de semi-groupes [11]. Il convient de signaler, d'une part que les notions ici proposées sont beaucoup plus limitées, d'autre part et surtout qu'elles sont utilisées comme instruments d'une exposition plus traditionnelle de la mécanique quantique, celle utilisant assez systématiquement l'opérateur-densité (et, plus subsidiairement, le vecteur d'état) [12, 13].

**Appendice—Démonstration de L'Inégalité (13)**

L'opérateur-densité doit être semi-défini positif, c'est-à-dire que l'on doit avoir:

$$\langle \Psi^\alpha | \hat{\rho} | \Psi^\alpha \rangle \geq 0, \quad \forall |\Psi^\alpha\rangle \in \mathcal{H}_n \quad (25)$$

ou encore

$$\text{Tr}(\hat{\rho}|\Psi^\alpha\rangle\langle\Psi^\alpha|) \geq 0, \quad \forall |\Psi^\alpha\rangle \in \mathcal{H}_n \quad (26)$$

d'où

$$\sum_\alpha p_\alpha \text{Tr}(\hat{\rho}|\Psi^\alpha\rangle\langle\Psi^\alpha|) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\rho}_V) \geq 0, \quad \forall \hat{\rho}_V. \quad (27)$$

Dans le passage de (26) à (27), nous avons introduit l'opérateur-densité arbitraire (et variable)  $\hat{\rho}_V$  défini par:

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha p_\alpha |\Psi^\alpha\rangle\langle\Psi^\alpha|$$

avec

$$p_\alpha \in \mathcal{R}, \quad 0 \leq p_\alpha \leq 1$$

$$\sum_\alpha p_\alpha = 1.$$

Si nous écrivons  $\hat{\rho}$  et  $\hat{\rho}_V$  sous la forme (10), il vient:

$$\hat{\rho}\hat{\rho}_V = \frac{1}{n^2} \left( \hat{I} + \sum_{J=1}^r P_J \hat{Q}_J + \sum_{J=1}^r P_J^V \hat{Q}_J + \sum_{J,K=1}^r P_J P_J^V \hat{Q}_J \hat{Q}_K \right)$$

d'où

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\rho}_V) = \frac{1}{n} + \frac{1}{n^2} \sum_{J,K=1}^r P_J P_K^V \delta_{JK}$$

$$= \frac{1}{n} + \frac{1}{n^2} \mathbf{P} \cdot \mathbf{P}^V \geq 0, \quad \forall \mathbf{P}^V \in D \quad (28)$$

d'où l'inégalité (13).

Les inégalités (25) à (28) sont équivalentes entre elles.

L'inégalité (28) doit être vérifiée quel que soit le vecteur  $\mathbf{P}^V$  variant dans le domaine convexe  $D$  de  $\mathcal{E}_r$ .

*Remarque*

Si  $\hat{\rho}_I$  et  $\hat{\rho}_{II}$  sont deux opérateurs-densités, on sait que

$$\hat{\rho} = p_I \hat{\rho}_I + p_{II} \hat{\rho}_{II} \quad (29)$$

avec

$$p_I, p_{II} \geq 0, \quad p_I + p_{II} = 1$$

est également un opérateur-densité.

La formule (2a) entraîne pour les vecteurs représentatifs dans  $\mathcal{E}_r$ :

$$\mathbf{P} = p_I \mathbf{P}_I + p_{II} \mathbf{P}_{II}.$$

Si  $\mathbf{P}_I$  et  $\mathbf{P}_{II}$  appartiennent à un domaine  $D$  de  $\mathcal{E}_r$ ,  $\mathbf{P}$  lui appartient aussi, quelles que soient les valeurs de  $p_I$  et  $p_{II}$ , c'est-à-dire que le domaine  $D$  est convexe [10].

### Bibliographie

- [1] U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 74 (1957).
- [2] F. T. Hioe et J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 838 (1981).
- [3] Voir, par exemple, D. B. Lichtenberg, *Unitary Symmetry and Elementary Particles* (Academic Press, New York et Londres, 1970) chap. 6.
- [4] W. Band et J. L. Park, *Foundations of Physics* **1**, 133 (1970).
- [5] J. L. Park et W. Band, *Foundations of Physics* **1**, 211 (1971).
- [6] U. Fano et G. Racah, *Irreducible Tensorial Sets* (Academic Press, New York, 1959).
- [7] J. M. Jauch, *Helv. Phys. Acta* **37**, 293 (1964).
- [8] J. M. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics* (Addison Wesley, Reading, Mass., 1968).
- [9] P. O. Löwdin, *Int. J. Quantum Chem., Suppl.* **1**, 12, 197 (1977).
- [10] P. O. Löwdin, *Int. J. Quantum Chem.* **21**, 275 (1982).
- [11] H. S. Green, *Int. J. Quantum Chem.* **17**, 121 (1980).
- [12] J. L. Park et H. Margenau, *Int. J. Theor. Phys.* **1**, 211 (1968).
- [13] L. E. Ballentine, *Rev. Mod. Phys.* **42**, 358 (1970).

Received June 8, 1982

Accepted for publication October 21, 1982

Dans un deuxième article (noté IV, à cause de la chronologie des publications), nous examinons certaines conséquences, pour le vecteur de cohérence  $\vec{P}$  associé à un état  $\hat{\rho}$ , des trois propriétés fondamentales que doit posséder cet opérateur pour pouvoir être un opérateur-densité.

- $\alpha$ ) être hermitique
- $\beta$ ) être de trace unité
- $\gamma$ ) être semi-défini positif

Si l'on effectue une combinaison linéaire réelle d'opérateurs-densités

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \hat{\rho}^{\alpha} \quad (3-a)$$

la propriété  $\beta$  impose alors

$$\sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1 \quad (3-b)$$

pour que  $\hat{\rho}$  soit également un opérateur-densité.

Ces expressions reportées dans (2) fournissent la même relation entre les vecteurs de cohérence

$$\vec{P} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \vec{p}^{(\alpha)} \quad (4)$$

Si l'on restreint les combinaisons linéaires utilisées à celles vérifiant (3-b) et

$$\forall \alpha, \quad 0 \leq p_{\alpha} \leq 1 \quad (3-c)$$

alors  $\hat{\rho}$  possède nécessairement les trois propriétés  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  (les opérateurs  $\hat{\rho}^{(\alpha)}$  sont, bien entendu, supposés être des opérateurs-densités). Nous appellerons  $\bar{D}$  le sous-ensemble de  $\bar{E}_r$  composé des vecteurs de cohérence. Nous venons de voir que cet ensemble est stable pour les combinaisons linéaires vérifiant (3-b) et (3-c), ce qui équivaut à l'affirmation :  $\bar{D}$  est un ensemble convexe. Les combinaisons linéaires précédentes décrivent le mélange statistique des états représentés par

les opérateurs  $\hat{\rho}^{(\alpha)}$  (qui ne sont pas supposés purs). Les coefficients  $p_\alpha$  sont les poids statistiques dans le mélange. L'ensemble des états purs peut alors être introduit comme l'ensemble des états qui engendrent tous les autres par mélange statistique et qui ne peuvent pas eux-mêmes être obtenus par mélange statistique.

L'article IV est essentiellement consacré à préciser la géométrie du domaine  $\bar{D}$ . Celle-ci est assez compliquée à déterminer dès que  $n$  est supérieur à 2 (\*), puisque l'on a affaire à un domaine dans un espace à  $r = n^2 - 1$  dimensions. Les résultats obtenus montrent que le cas  $n = 2$ , souvent utilisé dans la littérature, au moins à titre d'illustration de l'usage des opérateurs-densités, est trop simple et masque la complexité du problème posé par les conditions restrictives imposées aux vecteurs de cohérence.

---

(\*) Pour  $n = 2$ , on sait que  $\bar{D}$  est une sphère dans  $\mathcal{E}_3$ , la frontière de cette sphère est entièrement constituée d'états purs. Pour  $n > 2$ ,  $\bar{D}$  n'est plus une sphère et les états purs ne sont qu'une petite partie de la frontière.

## Usage de L'Algèbre de Lie $su(n)$ dans l'Étude des Systèmes Quantiques à $n$ États. IV. Geometrie du Domaine des Vecteurs de Cohérence

AUGUSTIN VAN GROENENDAEL

*Laboratoire de Physique Théorique, Université de Lille 1, 36, F-59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France*

### Abstract

The density operator of an  $n$  level quantum system is known to be a positive semidefinite, hermitian operator of trace one. In a previous article we have established, through  $su(n)$  algebras, a formalism where density operators are built from coherence vectors in a  $n^2 - 1$  dimension, real, Euclidean space. The last two conditions are then automatically satisfied. Being positive semidefinite means a restriction to the domain of coherence vectors. In this article we clarify this domain and obtain several equivalent tests to know if a given vector is part of it.

Par définition, l'opérateur-densité d'un système quantique à  $n$  états est soumis à trois conditions: il doit être Hermitique, de trace unité et semidéfini positif. Dans un article précédent, en utilisant les algèbres  $su(n)$ , nous avons établi un formalisme où l'opérateur-densité est représenté par un vecteur de cohérence dans un espace réel Euclidien de dimension  $n^2 - 1$ . Les deux premières conditions sont alors automatiquement vérifiées. La troisième condition équivaut à restreindre le domaine des vecteurs de cohérence. Dans cet article, nous précisons ce domaine et nous obtenons plusieurs critères équivalents permettant de reconnaître si un vecteur en fait partie.

### 1. Introduction

(1a) On sait que l'état d'un système quantique  $\mathcal{S}_Q$  peut être défini et décrit mathématiquement par un opérateur-densité  $\hat{\rho}$  [1-4] agissant sur un espace vectoriel  $\mathcal{H}$ .

Les opérateurs-densités sont caractérisés par les trois propriétés suivantes:

( $\alpha$ )  $\hat{\rho}$  est hermitique,

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^+, \quad (1)$$

( $\beta$ )  $\hat{\rho}$  est de trace unité,

$$\text{tr } \hat{\rho} = 1, \quad (2)$$

( $\gamma$ )  $\hat{\rho}$  est semidéfini positif,

$$\forall \hat{\rho} \in \mathcal{H} \quad \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0. \quad (3)$$

(1b) On sait également (voir, par exemple, Ref. 4) que l'ensemble des opérateurs-densités forme un ensemble convexe, c'est-à-dire que, si on considère des opérateurs-densités  $\hat{\rho}_\alpha$ , tous les opérateurs de la forme

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \hat{\rho}_{\alpha}, \tag{4}$$

$$0 \leq p_{\alpha} \leq 1, \quad \sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1,$$

sont aussi des opérateurs-densités.

En particulier, tout opérateur-densité peut être mis sous la forme (4) en prenant pour  $\hat{\rho}_{\alpha}$  des états purs, c'est-à-dire des projecteurs

$$\hat{\rho}_{\alpha}^2 = \hat{\rho}_{\alpha}. \tag{4a}$$

On dit que l'ensemble convexe des états est engendré par les états purs qui constituent sa frontière.

(2) Lorsque l'espace  $\mathcal{H}$  du système  $\mathcal{S}_Q$  est de dimension finie  $n$ , l'ensemble des opérateurs hermitiques de trace nulle, muni de l'opération  $i[\cdot, \cdot]$ , forme une algèbre de Lie  $\mathcal{E}$ , isomorphe à  $su(n)$  [5, 6, 7]. Cet espace  $\mathcal{E}_r$ , de dimension  $r = n^2 - 1$ , a été appelé espace des observables [5, 8].

En introduisant dans  $\mathcal{E}$ , une  $F$  base  $\{\hat{Q}_j\}$  ou base orthonormée au sens de Fano [8], on peut écrire tout opérateur-densité sous la forme

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} \left( \hat{I} + \sum_{j=1}^r P_j \hat{Q}_j \right), \tag{5}$$

où le vecteur de cohérence  $\mathbf{P}$  [6, 9], de composantes  $P_j$ , peut être considéré comme un vecteur dans un espace euclidien  $\overline{\mathcal{E}}_r$  (isomorphe à  $\mathcal{E}_r$ ) que nous appellerons désormais l'espace de cohérence. Chaque opérateur-densité définit un vecteur  $\mathbf{P}$  unique.

Réciproquement, tout vecteur  $\mathbf{P}$  de  $\overline{\mathcal{E}}_r$  définit un opérateur qui vérifie automatiquement les conditions  $\alpha$  et  $\beta$ , mais non la condition  $\gamma$ .

Pour montrer qu'un opérateur définit un état, il faut vérifier les trois conditions  $\alpha, \beta, \gamma$ . Dans l'espace de cohérence  $\overline{\mathcal{E}}_r$ , il est nécessaire et suffisant de vérifier une seule condition, correspondant à  $\gamma$ . Nous appellerons  $\overline{\mathcal{D}}$  le domaine de  $\overline{\mathcal{E}}_r$ , qui contient les vecteurs  $\mathbf{P}$  vérifiant cette condition.

En utilisant la relation (5), on vérifie facilement que le domaine  $\overline{\mathcal{D}}$  est un domaine convexe de  $\overline{\mathcal{E}}_r$ , engendré par les vecteurs de cohérence des états purs, soit à partir de (4):

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \mathbf{P}_{\alpha}. \tag{6}$$

D'autre part, il a été montré [6] que l'on doit avoir

$$\mathbf{P}^2 \leq n(n - 1). \tag{7}$$

(L'égalité n'a lieu que pour les cas purs.) Cette condition est nécessaire pour que  $\hat{\rho}$  soit semidéfini positif. Elle n'est pas suffisante si  $n > 2$ .

Dans cet article, nous nous proposons d'étudier la géométrie du domaine convexe  $\overline{\mathcal{D}}$  de  $\overline{\mathcal{E}}_r$ , c'est-à-dire de déterminer les conditions que doit satisfaire un vecteur  $\mathbf{P}$  de  $\overline{\mathcal{E}}_r$ , pour pouvoir représenter un état de  $\mathcal{S}_Q$ . Dans ce but, nous utiliserons quelques propriétés des sous-algèbres de Cartan  $\mathcal{E}_{n-1}^c$  de  $\mathcal{E}_r$ , c'est-à-dire des algèbres de Lie commutatives, de dimension  $n - 1$  [10].

## 2. Premières Considerations Geometriques

(a) D'après (7), nous pouvons déjà écrire d'une part qu'un vecteur  $P$  de  $\mathcal{E}_r$ , pour être un vecteur de cohérence, doit être situé dans une sphère  $\Sigma$  de rayon  $\sqrt{n(n-1)}$ , centrée à l'origine de  $\mathcal{E}_r$ , d'autre part que les vecteurs de cohérence des états purs doivent avoir leur extrémité sur la surface  $\mathcal{S}_\Sigma$  de cette sphère (les vecteurs de cohérence sont alors à l'intérieur de  $\Sigma$ ).

Si on remarque que  $\mathcal{S}_\Sigma$  est une variété réelle de dimension  $n^2 - 2$ , tandis que l'ensemble des états purs constitue dans  $\mathcal{E}_r$  une variété réelle de dimension  $2n - 2$ , on peut conclure que, sauf dans le cas  $n = 2$ , il est impossible que tout point de  $\mathcal{S}_\Sigma$  corresponde à un état pur du système.

(b) Pour préciser le domaine  $\mathcal{D}$ , il faut exploiter davantage le caractère semidéfini positif de  $\hat{\rho}$ .

Nous allons utiliser pour cela, une  $F$  base de  $\mathcal{E}_r$ , obtenue à partir d'une base orthonormée de  $\mathcal{H}$  [5, 9]. En reprenant les notations de l'article [5], celle-ci est notée:

$$\{|v_j\rangle\} \quad j = 1, \dots, n,$$

et la  $F$  base correspondante:

$$\{\hat{Q}_J\} \quad J = 1, \dots, n^2 - 1.$$

Les  $n - 1$  premiers éléments de cette  $F$  base sont notés  $\hat{Q}_J$  avec  $J = 1, \dots, n - 1$ . Ils sont obtenus à partir des projecteurs:

$$\hat{\pi}_j = |v_j\rangle\langle v_j|,$$

qui n'appartiennent pas à  $\mathcal{E}_r$ . Les  $\hat{Q}_J$  forment une  $F$  base orthonormée pour une sous-algèbre de Cartan  $\mathcal{E}_{n-1}^{c.v.}$ , qui sera dite associée à la base  $\{|v_j\rangle\}$  de  $\mathcal{H}$ . Les vecteurs de cohérence correspondants appartiennent à un sous-espace  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  de  $\mathcal{E}_r$ .

Les opérateurs correspondant aux vecteurs de  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  sont des combinaisons linéaires de l'identité et des  $\hat{Q}_J$ , eux-mêmes combinaisons linéaires des projecteurs  $\hat{\pi}_j$ . Ils commutent donc tous entre eux et leur représentation matricielle dans la base  $\{|v_j\rangle\}$  est diagonale. Réciproquement, tout opérateur diagonal dans cette base est une combinaison linéaire de l'identité et des  $n - 1$  opérateurs  $\hat{Q}_J$ . Nous établissons ainsi, au moyen de la relation (5) et pour une base donnée de  $\mathcal{H}$ , une correspondance entre les vecteurs de  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  et les opérateurs Hermitiques, de trace un, diagonaux dans cette base.

Tous ces opérateurs ne sont pas semidéfinis positifs. Avant de pouvoir exprimer cette propriété dans  $\mathcal{E}_r$ , tout entier, il est commode de l'étudier d'abord dans le sous-espace  $\mathcal{E}_{n-1}^v$ .

## 3. Geometrie de l'Intersection du Domaine Convexe $\mathcal{D}$ et d'un Sous-Espace $\mathcal{E}_{n-1}^v$

Nous allons chercher l'intersection  $\mathcal{D}^v$  de  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  avec le domaine convexe  $\mathcal{D}$  correspondant aux opérateurs semidéfinis positifs.

Soit  $P^{(j)}$  le vecteur de cohérence correspondant à l'état pur décrit par l'opérateur-densité  $\hat{\pi}_j$ . Le vecteur  $P^{(j)}$  fait donc partie du domaine  $\mathcal{D}^v$ ; d'autre part, puisqu'il

correspond à un état pur, il est de module  $\sqrt{n(n-1)}$  et son extrémité est sur la sphère  $\mathcal{S}_2$ .

Soit  $\hat{\rho}$  un opérateur-densité diagonal dans la base  $\{|v_j\rangle\}$ , il peut être écrit sous forme de la combinaison linéaire réelle:

$$\hat{\rho} = \sum_{j=1}^n \rho_j \hat{\pi}_j \tag{8}$$

avec

$$0 \leq \rho_j \leq 1, \tag{9}$$

$$\sum_{j=1}^n \rho_j = I. \tag{10}$$

Cherchons le vecteur de cohérence correspondant dans  $\mathcal{E}_{n-1}^v$ . Avec les définitions introduites ci-dessus, nous pouvons écrire

$$\hat{\pi}_j = \frac{1}{n} \left( \hat{I} + \sum_{r=1}^{n-1} P_r^{(j)} \hat{Q}_r \right), \tag{11}$$

d'où

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} \left( \sum_{j=1}^n \rho_j \right) \hat{I} + \sum_{r=1}^{n-1} \left( \sum_{j=1}^n \rho_j P_r^{(j)} \right) \hat{Q}_r. \tag{12}$$

La relation entre les vecteurs de cohérence est donc

$$\mathbf{P} = \sum_{j=1}^n \rho_j \mathbf{P}^{(j)}. \tag{13}$$

Les relations (9), (10), et (13) qui sont valables pour tous les opérateurs-densités diagonaux dans la base utilisée, montrent que ceux-ci appartiennent au domaine convexe  $\mathcal{D}^v$  engendré par les  $n$  vecteurs  $\mathbf{P}^{(j)}$ . Réciproquement, tout vecteur appartenant à ce domaine convexe engendre un opérateur-densité dont la matrice est diagonale dans la base  $\{|v_j\rangle\}$ . Les vecteurs de cohérence correspondant aux opérateurs "diagonaux" sont donc la totalité du domaine convexe  $\mathcal{D}^v$  engendré par les  $n$  vecteurs  $\mathbf{P}^{(j)}$ . Nous allons étudier la forme de ce domaine.

Un domaine convexe, à  $n$  sommets, engendré par  $n$  vecteurs dans un espace de dimension  $n-1$ , est appelé un simplexe [4]; c'est un domaine convexe ayant le plus petit nombre possible de sommets dans cet espace. Par exemple, dans un espace de dimension 1, un simplexe est un segment dont 2 vecteurs définissent les extrémités; dans un plan, c'est un triangle dont les sommets sont définis par 3 vecteurs; dans un espace de dimension 3, c'est un tétraèdre.

Le simplexe engendré par les  $n$  vecteurs  $\mathbf{P}^{(j)}$  associés à une base orthonormée de  $\mathcal{H}$  est très particulier. On sait déjà que tous ces vecteurs ont la même norme:

$$\|\mathbf{P}^{(j)}\| = \sqrt{n(n-1)}.$$

De plus, ils représentent des états deux à deux orthogonaux:

$$\hat{\pi}_j \hat{\pi}_k = 0, \quad j \neq k;$$

d'après un résultat établi dans [5], ce fait peut être exprimé

$$\mathbf{P}^{(j)} \cdot \mathbf{P}^{(k)} = -n. \quad (14)$$

C'est-à-dire que les vecteurs  $\mathbf{P}^{(j)}$  et  $\mathbf{P}^{(k)}$  font entre eux un angle  $\varphi$  tel que

$$\cos \varphi = \frac{\mathbf{P}^{(j)} \cdot \mathbf{P}^{(k)}}{\|\mathbf{P}^{(j)}\| \cdot \|\mathbf{P}^{(k)}\|} = \frac{-1}{n-1} \quad j \neq k. \quad (15)$$

Le domaine  $\overline{\mathcal{D}}^v$  est par conséquent un simplexe régulier (triangle équilatéral, tétraèdre régulier, etc.). Son centre de gravité est donné par

$$\mathbf{P} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \mathbf{P}^{(j)},$$

donc, d'après (13) et (8), la relation de fermeture dans  $\mathcal{H}$  et (5):

$$\mathbf{P} = 0.$$

Le domaine  $\overline{\mathcal{D}}^v$  est un simplexe régulier dont le centre de gravité est l'origine de  $\mathcal{E}_r$ .

Nous avons ainsi obtenu un mode de construction du domaine  $\overline{\mathcal{D}}^v$ , intersection du domaine complet  $\overline{\mathcal{D}}$  et du sous-espace  $\mathcal{E}_{n-1}^v$ . A partir d'une base orthonormée  $\{|v_j\rangle\}$  de  $\mathcal{H}$ , on obtient  $n$  vecteurs de cohérence associés aux projecteurs  $\hat{\pi}_j$ . Ces vecteurs ont leur extrémité sur la sphère  $\mathcal{S}_2$  et engendrent un simplexe régulier  $\overline{\mathcal{D}}^v$  inscrit dans cette sphère. Ce simplexe correspond à l'ensemble des matrices-densités diagonales dans la base  $\{|v_j\rangle\}$ .

#### 4. Remarques

(a) A une transformation  $U$  de  $\mathcal{H}$  correspond, comme nous l'avons montré dans Ref. 6, une transformation orthogonale  $\hat{O}[\hat{U}]$  de  $\mathcal{E}_r$ .  $\hat{O}[\hat{U}]$  transforme une sous-algèbre de Cartan en une autre sous-algèbre de Cartan,  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  en un autre sous-espace  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  et  $\overline{\mathcal{D}}^v$  en un autre simplexe  $\overline{\mathcal{D}}^v$  qui fait également partie de  $\overline{\mathcal{D}}$ . Le domaine des vecteurs de cohérence  $\overline{\mathcal{D}}$  peut donc être engendré à partir d'un simplexe  $\overline{\mathcal{D}}^v$  quelconque, en lui appliquant les opérations du sous-groupe  $\{\hat{O}[\hat{U}]\}$ , de dimension  $n^2 - 1$ , du groupe orthogonal spécial  $SO(n^2 - 1)$ . Une transformation orthogonale qui n'appartient pas au sous-groupe précédent transforme un point de  $\mathcal{S}_2$  en un point de  $\mathcal{S}_2$  mais pas nécessairement un point de  $\overline{\mathcal{D}}$ . Par conséquent, cette transformation peut transformer un vecteur représentant un état pur en un vecteur ne représentant pas un état. Par exemple, dans  $\mathcal{E}_{n-1}^v$ , il y a exactement  $n$  états purs (les points où le simplexe  $\overline{\mathcal{D}}^v$  touche  $\mathcal{S}_2$ ). Une transformation orthogonale peut transformer un de ces points en n'importe quel point de  $\mathcal{S}_2 \cap \mathcal{E}_{n-1}^v$ . Si le nouveau point n'est pas l'un des  $n$  états purs, alors il n'est pas un état du tout.

(b) Dans ce qui précède, nous avons utilisé une base orthonormée  $\{|v_j\rangle\}$  quelconque de  $\mathcal{H}$  construit à partir des  $n$  projecteurs correspondants, les opérateurs-densités appartenant à  $\overline{\mathcal{D}}^v$ .

Il est possible également de partir d'un opérateur-densité quelconque  $\hat{\rho}$  et d'utiliser les projecteurs propres qui figurent dans sa décomposition spectrale, soit

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_{j=1}^n \rho_j |\rho_j\rangle \langle \rho_j| \\ &= \sum_{j=1}^n \rho_j \hat{\pi}_j^{\rho} \end{aligned} \tag{16}$$

Cette décomposition spectrale définit un espace  $\mathcal{E}_{n-1}^{\rho}$  et un simplexe  $\mathcal{D}^{\rho}$  mais elle n'est pas toujours unique, ce qui permet de distinguer deux cas: (α) Aucune valeur propre  $\rho_j$  n'est dégénérée. Sa décomposition spectrale (16) est unique. La sous-algèbre de Cartan  $\mathcal{E}_{n-1}^{c:\rho}$  obtenue à partir de  $\pi_j^{\rho}$  est unique, ainsi que le sous-espace  $\mathcal{E}_{n-1}^{\rho}$  et le simplexe  $\mathcal{D}^{\rho}$ . (β) Une valeur propre au moins est dégénérée. La décomposition spectrale de  $\rho$  définit alors une infinité d'ensembles  $\{\hat{\pi}_j^{\rho}, j = 1, \dots, n\}$ , chacun d'eux donnant une sous-algèbre de Cartan différente. On en déduit donc une infinité d'espaces  $\mathcal{E}_{n-1}^{\rho}$  et de simplexes  $\mathcal{D}^{\rho}$  dans  $\mathcal{E}$ .

D'après la théorie des algèbres de Lie [7], ceci implique que, dans le premier cas,  $n \hat{\rho} - \hat{I}$  est un élément régulier de  $\text{su}(n)$ , dans le second cas, c'est un élément singulier.

### 5. Forme Generale des Conditions d'Appartenance au Domaine Convexe $\mathcal{D}$

Dans Ref. 5, nous avons montré l'équivalence des trois propositions suivantes:

- (i)  $\mathbf{P}$  représente un état du système ( $\mathbf{P} \in \mathcal{D}$ ).
- (ii)  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}' \geq -n$  pour tout  $\mathbf{P}'$  représentant un état pur.
- (iii)  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}' \geq -n$  pour tout  $\mathbf{P}'$  représentant un état.

A l'aide de ces propositions, nous pouvons maintenant chercher d'autres expressions pour les conditions que doit vérifier un vecteur de cohérence  $\mathbf{P}$  que l'on ne suppose plus appartenir à la sous-algèbre de Cartan associée à la base  $\{|v_j\rangle\}$  de  $\mathcal{H}$ .

Considérons le simplexe  $\mathcal{D}^v$  associé à une base orthonormée de  $\mathcal{H}$  et le sous-espace  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  correspondant. En prenant pour  $\mathbf{P}'$  les divers états purs situés dans  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  (sommets du simplexe  $\mathcal{D}^v$ ), la condition (ii) implique que, pour tout vecteur  $\mathbf{P}$  de  $\mathcal{D}$ , sa projection orthogonale dans  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  est dans le simplexe  $\mathcal{D}^v$ .

Nous pouvons donc énoncer une quatrième proposition équivalente aux trois précédentes:

- (iv) La projection de  $\mathbf{P}$  dans tout sous-espace de type  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  est dans le simplexe  $\mathcal{D}^v$ .

En utilisant cette proposition conjointement avec ce qui a été établi dans la partie III, nous obtenons deux méthodes pour vérifier si un vecteur  $\mathbf{P}$  appartient à  $\mathcal{D}$ .

La première part de la remarque qu'il fait toujours partie d'un sous-espace  $\mathcal{E}_{n-1}^v$ . Si l'on peut déterminer ce sous-espace, il faut alors montrer que  $\mathbf{P}$  est dans le simplexe  $\mathcal{D}^v$  correspondant. La seconde méthode consiste à prouver que la projection de  $\mathbf{P}$  sur tout sous-espace du type  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  est dans le simplexe  $\mathcal{D}^v$  correspondant.

Une application de ce qui précède est la démonstration d'une condition suffisante sur la norme de  $\mathbf{P}$ .

En effet, la sphère  $\Sigma^v$  inscrite dans l'un quelconque des simplexes  $\mathcal{D}^v$  est de rayon  $n/(n-1)$ . Si le module de  $\mathbf{P}$  est égal ou inférieur à cette valeur, la projection orthogonale de  $\mathbf{P}$  dans n'importe quel  $\mathcal{E}_{n-1}^v$  a un module plus petit, elle est donc dans  $\Sigma^v$  et *a fortiori* dans  $\mathcal{D}^v$ . La seconde méthode prouve alors que tout vecteur de mod-

ule inférieur ou égal à  $n/(n - 1)$  appartient à  $\overline{\mathcal{D}}$ , c'est-à-dire représente un état du système  $\zeta_0$ . L'ensemble de ces états forme une sphère que nous noterons  $\Sigma'$ .

Nous pouvons alors distinguer trois régions dans l'espace  $\mathcal{E}_r$ .

La région extérieure à  $\Sigma$ :

$$\sqrt{n(n - 1)} < \|\mathbf{P}\|,$$

le vecteur  $\mathbf{P}$  ne représente pas un état.

La surface de  $\Sigma$  et la région entre  $\Sigma$  et  $\Sigma'$ :

$$\frac{1}{n - 1} \sqrt{n(n - 1)} < \|\mathbf{P}\| \leq \sqrt{n(n - 1)},$$

le vecteur  $\mathbf{P}$  représente ou non un état selon sa direction. Il faut utiliser l'une des méthodes indiquées ci-dessus.

La surface et l'intérieur de  $\Sigma$ :

$$\|\mathbf{P}\| \leq \frac{1}{n - 1} \sqrt{n(n - 1)},$$

le vecteur  $\mathbf{P}$  représente un état mélangé.

## 6. Exemples

Nous allons illustrer les résultats précédents en examinant les cas  $n = 2$  et 3.

1/  $n = 2$ ;  $r = 3$ . Les sphères  $\Sigma$  et  $\Sigma'$  de rayon  $\sqrt{2}$  sont confondues. Puisque tous les points de la surface de  $\Sigma'$  représentent des états et que tous les états situés sur la surface de  $\Sigma$  sont des états purs, l'ensemble des états purs est constitué par la surface de la sphère  $\Sigma$  et l'ensemble des états mélangés par l'intérieur de  $\Sigma$ . On retrouve ainsi les résultats bien connus [11].  $\mathcal{E}_3$  est de dimension 3 et les espaces  $\mathcal{E}_1^v$  sont de dimension 1. Les simplexes  $\overline{\mathcal{D}}^v$  sont les diamètres de  $\Sigma$ , ils sont limités par deux états purs orthogonaux. Pour savoir si un vecteur quelconque  $\mathbf{P}$  de  $\mathcal{E}_3$  peut être un vecteur de cohérence, on peut appliquer la première méthode ci-dessus, en déterminant l'espace  $\mathcal{E}_1^c$  qui contient  $\mathbf{P}$ , c'est-à-dire ici l'ensemble des vecteurs colinéaires à  $\mathbf{P}$ ; cet espace détermine un simplexe  $\overline{\mathcal{D}}^v$  qui est un diamètre de  $\Sigma$ ; pour que  $\mathbf{P}$  soit dans ce simplexe, il faut et il suffit que  $\mathbf{P}$  soit dans ou sur la sphère  $\Sigma$ .

La seconde méthode revient à considérer les projections de  $\mathbf{P}$  sur toutes les droites passant par l'origine de  $\mathcal{E}_3$ . Exiger que toutes ces projections soient sur les diamètres correspondants de  $\Sigma$ , aboutit à obtenir à nouveau l'intérieur et la surface de la sphère.

2/  $n = 3$ ;  $r = 8$ . Le rayon de  $\Sigma$  est  $\sqrt{6}$ , celui de  $\Sigma'$  est  $\frac{1}{2}\sqrt{6}$ ,  $\mathcal{E}_8$  est de dimension 8, les sous-espaces  $\mathcal{E}_2^v$  sont de dimension 2. Dans un sous-espace  $\mathcal{E}_2^v$  donné, les 3 vecteurs représentant des états purs font entre eux des angles de  $120^\circ$  puisque

$$\cos \varphi = \frac{-n}{n(n - 1)} = -\frac{1}{2}.$$

Le simplexe  $\overline{\mathcal{D}}^v$  est un triangle équilatéral inscrit dans le cercle de rayon  $\sqrt{6}$  qui est l'intersection de  $\Sigma$  et de  $\mathcal{E}_2^v$ . Ce simplexe est également circonscrit au cercle de rayon  $\frac{1}{2}\sqrt{6}$  qui est l'intersection de  $\Sigma'$  et de  $\mathcal{E}_2^v$  (voir Fig. 1).

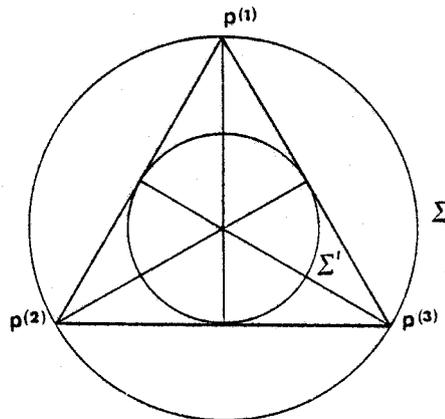


Figure 1. Structure de l'espace  $\mathcal{E}_2^v$ .

Pour appliquer la première méthode à un vecteur  $\mathbf{P}$ , on commence par choisir un sous-espace  $\mathcal{E}_2^v$  contenant ce vecteur. Le problème est ramené à 2 dimensions au lieu de 8 et il faut alors que  $\mathbf{P}$  soit dans le triangle.

Nous avons vu, dans les remarques, qu'il y avait lieu de distinguer différents cas suivant la dégénérescence des valeurs propres de la matrice  $\hat{\rho}$ . Dans le cas présent  $n = 3$ , il y a donc trois possibilités: une seule valeur propre triplement dégénérée,  $\hat{\rho} = \frac{1}{3}\hat{I}$ ,  $\mathbf{P} = 0$ ; une valeur propre doublement dégénérée et une non dégénérée; aucune valeur propre dégénérée.

Dans le premier cas, l'état est représenté par l'origine de  $\mathcal{E}_8$ , il appartient à tous les sous-espaces  $\mathcal{E}_2^v$ .

Dans le second cas, les deux états purs correspondant à la valeur propre dégénérée figurent avec le même poids  $\rho_i$  et le vecteur  $\mathbf{P}$  se trouve sur l'une des hauteurs du triangle  $\mathcal{D}^v$ .

Les deux cas que nous venons de voir correspondent aux matrices  $\mathcal{E}_2^{c,v}$  dites singulières dans la théorie des algèbres de Cartan.

Dans le troisième cas, nous obtenons les matrices régulières de la théorie des algèbres de Cartan. Elles correspondent à tous les vecteurs  $\mathbf{P}$  du triangle, qui ne sont pas sur une hauteur.

Voyons maintenant quelles sont les intersections possibles entre les plans  $\mathcal{E}_2^v$ . Si un vecteur  $\mathbf{P}$  appartient à deux espaces  $\mathcal{E}_2^v$  et  $\mathcal{E}_2^{v'}$  distincts, cela signifie que la matrice  $\hat{\rho}$  correspondante est diagonale dans deux bases distinctes. On est donc dans l'un des deux premiers cas précédents. Par conséquent, deux espaces  $\mathcal{E}_2^v$  et  $\mathcal{E}_2^{v'}$  distincts se coupent soit uniquement à l'origine, soit suivant une hauteur commune à  $\mathcal{D}^v$  et  $\mathcal{D}^{v'}$ .

A partir de la figure ci-dessus, on voit également qu'une transformation orthogonale de  $\mathcal{E}_8$  peut transformer le vecteur d'un état pur en un vecteur qui ne représente pas un état. En effet, considérons une transformation orthogonale qui laisse invariants les vecteurs de l'espace à 6 dimensions orthogonal à la figure et qui soit une rotation dans le plan de cette figure. Si l'angle de rotation est différent de  $120^\circ$ , un état pur donne un vecteur qui ne représente pas un état.

### 7. Conclusion

Nous avons montré comment, en utilisant certains résultats généraux de la théorie de l'algèbre de Lie  $su(n)$ , portant essentiellement sur l'existence et la dimension des sous-algèbres de Cartan, il est possible de construire le domaine  $\overline{\mathcal{D}}$  des vecteurs de cohérence dans l'espace de cohérence  $\overline{\mathcal{E}}$ . Rappelons que seul un point dans  $\overline{\mathcal{D}}$  ou sur sa frontière peut définir un état du système  $\mathcal{S}_Q$  et donc un opérateur-densité présentant bien le caractère semidéfini positif qui est une de ses propriétés fondamentales. (Par contre, à un vecteur quelconque de  $\overline{\mathcal{E}}$ , on peut toujours associer une observable de trace nulle).

On voit facilement que, par suite de la définition de  $\overline{\mathcal{D}}$ , une évolution Hamiltonienne:

$$\mathbf{P}(t) = \hat{O}[\hat{U}(t)]\mathbf{P}(t_0)$$

conserve le domaine  $\overline{\mathcal{D}}$ . Il faut qu'il en soit de même si l'on suppose que l'évolution de  $\mathcal{S}_Q$  n'est plus hamiltonienne mais décrite par une équation pilote (master equation). Le maintien de la trajectoire de  $\mathbf{P}(t)$  à l'intérieur de  $\overline{\mathcal{D}}$  peut alors imposer certaines conditions à ce type d'évolution.

### Acknowledgment

Je remercie le Professeur J. Tillieu dont l'aide et les encouragements m'ont permis de mener à bien ce travail.

### Bibliography

- [1] J. Von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, NJ, 1955).
- [2] J. L. Park et H. Margenau, *Int. J. Theor. Phys.* 1, 211 (1968).
- [3] L. E. Ballentine, *Rev. Mod. Phys.* 42, 358 (1970).
- [4] E. G. Beltrametti et G. Cassinelli, *The Logic of Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1981).
- [5] J. Tillieu et A. Van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* 23, 1807 (1983).
- [6] J. Tillieu et A. Van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* 23, 1817 (1983).
- [7] N. Jacobson, *Lie Algebras*, Interscience Tracts, Vol. 10 (Wiley, New York, 1962).
- [8] U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* 29, 74 (1957).
- [9] F. T. Hioe et J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* 47, 838 (1981).
- [10] H. Bacry, *Leçons sur la Théorie des Groupes et les Symétries des Particules Élémentaires* (Gordon & Breach, Dunod, 1967).
- [11] Par exemple, K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (Plenum, New York, London, 1981).

Received May 22, 1984

Accepted for publication June 12, 1984

### III - ETUDE DE L'EVOLUTION HAMILTONIENNE D'UN SYSTEME

Dans le chapitre précédent, nous avons obtenu des propriétés générales des systèmes quantiques, qui doivent être vérifiées à chaque instant. Nous allons maintenant étudier des propriétés qui concernent des instants différents, c'est-à-dire étudier l'évolution du système. Dans ce chapitre, nous n'étudierons que les évolutions pour lesquelles existe un hamiltonien. Cela signifie que l'on peut négliger les phénomènes de relaxation. Cette hypothèse ne peut être considérée comme valable pendant un temps long puisqu'elle interdit l'évolution d'un état pur vers un état d'équilibre thermodynamique qui est un mélange. Elle est cependant parfaitement justifiée pour une perturbation forte pendant un temps court.

#### a) EVOLUTION HAMILTONIENNE DU VECTEUR DE COHERENCE

Lorsqu'il existe un hamiltonien, l'évolution du système est décrite, dans l'espace  $\mathcal{H}$ , par un opérateur unitaire d'évolution  $\hat{U}$ . Dans la description de Schrödinger, l'opérateur-densité  $\hat{\rho}$  évolue suivant la relation

$$\hat{\rho}' = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger$$

Dans le formalisme que nous utilisons, il a été établi, dans l'article II, qu'à l'opérateur unitaire  $\hat{U}$  sur  $\mathcal{H}$  correspond un opérateur orthogonal  $|\hat{U}|$  sur l'espace de cohérence  $\mathcal{E}_r$ . Ces opérateurs forment la représentation adjointe du groupe  $SU(n)$  des opérateurs unitaires sur  $\mathcal{H}$ . Nous pouvons également passer de la représentation active à la représentation passive. Une matrice  $\hat{U}$  de  $SU(n)$  transforme les matrices de base  $\hat{Q}_j$  en

$$\hat{Q}_J \rightarrow \hat{U} \hat{Q}_J \hat{U}^+$$

Ceci revient à faire un changement de base dans  $\mathcal{E}_r$ . Le vecteur de cohérence représentant le même opérateur-densité n'a plus les mêmes composantes. La matrice représentant cette transformation sur  $\mathcal{E}_r$  est l'inverse  $\hat{O}^{-1}|\hat{U}|$  de la matrice précédente. Lorsque l'opérateur  $\hat{U}$  représente une évolution au cours du temps, le passage d'une représentation active à une représentation passive correspond au passage de la description de Schrödinger à celle de Heisenberg. Il peut être utile de remarquer que ces transformations  $\hat{O}|\hat{U}|$  ne sont pas toutes les transformations orthogonales.

En effet, le groupe  $U(n)$  des matrices unitaires est de dimension  $n^2$ . Le noyau de l'homomorphisme  $\hat{U} \rightarrow \hat{O}|\hat{U}|$  est  $\{e^{i\alpha} \hat{I} \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$  de dimension 1 ; le groupe des matrices  $\hat{O}|\hat{U}|$  est donc de dimension  $n^2 - 1$ . Par ailleurs le groupe des matrices orthogonales  $\hat{O}$  sur  $\mathcal{E}_r$  est de dimension  $\frac{1}{2}(n^2-1)(n^2-2)$ , supérieur à  $n^2-1$  pour  $n$  plus grand que 2 (\*).

Reprenons maintenant les transformations actives, et considérons les opérateurs  $\hat{U}$  comme des opérateurs d'évolution. Le hamiltonien (\*\*) apparaît alors comme un élément de l'algèbre de Lie  $\mathfrak{su}(n)$ , ce qui d'une part en fait un élément de  $\mathcal{E}_r$  et d'autre part le fait agir sur  $\mathcal{E}_r$  par l'intermédiaire de la représentation adjointe. Par l'usage d'une base  $\{\hat{Q}_J\}$  de  $\mathcal{E}_r$ , un hamiltonien induit donc un vecteur  $\vec{h}$  de  $\mathcal{E}_r$  et une matrice  $\hat{\Omega}$  agissant sur  $\mathcal{E}_r$ . Avec les notations de cette thèse, qui ne sont pas toujours identiques à celles de l'article II, nous avons donc la structure d'algèbre de Lie de  $\mathcal{E}_r$  définie par :

$$[\hat{Q}_J, \hat{Q}_K] = -i C_{JKL} \hat{Q}_L \quad (1)$$

et la représentation adjointe  $\hat{Q}_J \rightarrow \hat{\Gamma}_J$  définie par :

(\*) Pour  $n = 2$ , le domaine  $\bar{D}$  est la sphère, il est effectivement conservé par toutes les rotations.

(\*\*) Hamiltonien supposé de trace nulle (voir plus loin)

$$(\hat{\Gamma}_J)_{MK} = C_{MJK} \quad \text{et} \quad [\hat{\Gamma}_J, \hat{\Gamma}_K] = C_{JKL} \hat{\Gamma}_L \quad (2)$$

Un opérateur hermitique  $\hat{G}$  est décomposé dans la base  $\{\hat{Q}_J\}$  sous la forme

$$\hat{G} = \frac{1}{n} (\text{tr}(\hat{G}) \hat{I} + \sum_J G_J \hat{Q}_J) \quad (3)$$

analogue à la forme (II-2) de l'opérateur-densité.

Cette définition de  $\hat{G}$  diffère légèrement de celle utilisée dans l'article II. La trace de l'opérateur hamiltonien ne joue aucun rôle et nous la supposons désormais nulle. Par conséquent

$$\hat{H} = \frac{1}{n} \sum_J h_J \hat{Q}_J, \quad \text{avec} \quad h_J = n \text{tr}(\hat{H} \cdot \hat{Q}_J) \quad (4)$$

L'évolution de l'opérateur-densité

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} (\hat{I} + \sum_J P_J \hat{Q}_J) \quad (5)$$

peut alors être exprimée par l'équation différentielle dans  $\vec{\mathcal{E}}_r$

$$\frac{d\vec{\mathcal{P}}}{d\mathcal{E}} = \hat{\Omega} \vec{\mathcal{P}} \quad (6)$$

avec

$$\hat{\Omega} = -\frac{1}{n\hbar} \sum_J h_J \hat{\Gamma}_J \quad (7)$$

Dans le cas d'un système soumis à une perturbation, on obtient des équations semblables en utilisant la description d'interaction. L'opérateur  $\hat{\Omega}$  est alors exprimé à l'aide des composantes  $h_L^{\text{int}}$  du hamiltonien de perturbation, ce qui entraîne la conséquence intéressante que  $\hat{\Omega} \vec{\mathcal{P}}$  est petit devant  $\vec{\mathcal{P}}$ . Cette représentation a été utilisée dans le dernier paragraphe de l'article.

## Usage de l'Algèbre de Lie $su(n)$ dans l'Étude des Systèmes Quantiques à $n$ États. II. Transformations de l'Espace des Observables, Problèmes d'Évolution

JACQUES TILLIEU ET AUGUSTIN VAN GROENENDAEL  
*Laboratoire de Physique Théorique, Université de Lille I, F-59655 Villeneuve D'Ascq, France*

### Abstracts

In the previous paper we examined, for a quantum system, the relation between its  $n$ -dimensional state space and the  $su(n)$  Lie algebra. The present paper is devoted to relations between unitary transformations in the state space and orthogonal transformations in Lie's algebra. Two cases can happen. First, the transformations are independently chosen in the two spaces; this amounts to changing the former relation. On the other hand, the relation is maintained and the unitary operators are then related to some of the orthogonal operators. This second case is used to study the evolution operators.

Dans un article précédent, on a étudié, pour un système quantique, la correspondance entre un espace des états, de dimension finie,  $n$ , et l'algèbre de Lie  $su(n)$ . Dans cet article, les relations entre transformations unitaires dans l'espace des états et transformations orthogonales dans l'algèbre de Lie sont étudiées. Deux situations peuvent se produire: soit les transformations sont choisies indépendamment dans les deux espaces, ce qui équivaut simplement à un changement dans la loi de correspondance; soit, au contraire, la loi de correspondance est conservée, et aux opérateurs unitaires sont alors associées seulement certaines des transformations orthogonales. Cette seconde possibilité est utilisée dans l'étude des opérateurs d'évolution.

### 1. Introduction

Dans un article précédent [1], nous avons montré comment, pour étudier un système quantique  $S_Q$  pouvant exister dans  $n$  états, il est commode d'introduire une algèbre de Lie réelle  $\mathcal{E}_n$ , appelée espace des observables, de dimension  $r = n^2 - 1$ , isomorphe à  $su(n)$ , et d'utiliser, dans  $\mathcal{E}_n$ , une base orthonormée au sens de Fano [2], constituée par des opérateurs hermitiques  $\hat{Q}_J (J = 1 \rightarrow r)$ , de trace nulle et tels que:

$$\text{Tr}(\hat{Q}_J \hat{Q}_K) = \delta_{JK} \quad (1)$$

(La trace est calculée sur l'espace des états  $\mathcal{H}_n$ .)

Toute observable peut alors être écrite:

$$\hat{G} = \frac{\text{Tr}(\hat{G})}{n} \hat{I} + \sum_{J=1}^r G_J \hat{Q}_J \quad (2)$$

avec

$$G_J = \text{Tr}(\hat{G} \hat{Q}_J) \quad (2')$$

Les  $G_J$  sont les "composantes" de  $\hat{G}$  (ce sont des nombres réels), que l'on peut aussi considérer comme les composantes d'un vecteur  $\mathbf{G}$  appartenant à un espace réel  $\bar{\mathcal{E}}_m$  de dimension  $r$  (isomorphe à  $\mathcal{E}_r$ ).

En particulier, l'opérateur-densité décrivant l'état de  $S_Q$  peut être écrit sous la forme:

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{n} \hat{I} + \sum_J P_J(t) \hat{Q}_J \quad (3)$$

$$= \frac{1}{n} \hat{I} + \mathbf{P}(t) \hat{\mathbf{Q}} \quad (3')$$

où le "vecteur de cohérence"  $\mathbf{P}(t)$  [3] appartient à  $\bar{\mathcal{E}}_r$ . On a:

$$P_J(t) = \text{Tr} [\hat{Q}_J \hat{\rho}(t)]. \quad (3'')$$

Dans cet article, nous nous proposons d'étudier l'évolution de  $\mathbf{P}(t)$ , en la déduisant d'une correspondance entre opérateurs unitaires de  $\mathcal{H}_n$  et opérateurs réels orthogonaux de  $\bar{\mathcal{E}}_r$  (ou  $\mathcal{E}_r$ ).

## 2. Correspondance entre Opérateurs Unitaires de l'Espace des Etats et Opérateurs Réels Orthogonaux de l'Espace des Observables

a) Lorsque la  $F$ -base  $\{\hat{Q}_J\}$  est fixée, la relation (3') établit une correspondance (biunivoque) entre un opérateur-densité de  $\mathcal{H}_n$  et un vecteur  $\mathbf{P}$  de  $\bar{\mathcal{E}}_r$ .

Considérons le transformé de l'opérateur-densité  $\hat{\rho}$  par une transformation unitaire  $\hat{U}$  que nous pouvons, sans restriction gênante, prendre unimodulaire [ $\hat{U} \in \text{SU}(n)$ ], soit:

$$\hat{\rho}' = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^+ = \sum_J P'_J \hat{Q}_J \quad (4)$$

$\hat{U}$  est ici considérée comme une transformation active de  $\mathcal{H}_n$ , engendrant une transformation active de  $\bar{\mathcal{E}}_m$ , qui transforme le vecteur  $\mathbf{P}$  en un vecteur  $\mathbf{P}'$  de composantes  $P'_J$  telles que:

$$\begin{aligned} P'_J &= \text{Tr} (\hat{Q}_J \hat{\rho}') = \text{Tr} (\hat{Q}_J \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^+) \\ &= \sum_K \text{Tr} (\hat{Q}_J \hat{U} \hat{Q}_K \hat{U}^+) P_K \end{aligned} \quad (5)$$

Posons:

$$\hat{O}_{JK}[\hat{U}] = \text{Tr} (\hat{Q}_J \hat{U} \hat{Q}_K \hat{U}^+). \quad (6)$$

La relation (5) peut être réécrite:

$$P'_J = \sum_K O_{JK}[\hat{U}] P_K, \quad J = 1 \rightarrow r \quad (5')$$

On peut aussi écrire:

$$\mathbf{P}' = \hat{O}[\hat{U}] \mathbf{P} \quad (7)$$

c'est-à-dire qu'à la transformatin unitaire unimodulaire  $\hat{U}$  agissant sur  $\mathcal{H}_n$ , on fait correspondre la transformation  $\hat{O}[\hat{U}]$  agissant sur  $\mathcal{E}_r$  (c'est une rotation dans  $\mathcal{E}_r$ , [2]).

$\hat{O}[\hat{U}]$  est une transformation réelle; en effet:

$$\begin{aligned} O_{JK}^* &= \text{Tr}(\hat{Q}_J \hat{U} \hat{Q}_K \hat{U}^\dagger) = \text{Tr}(\hat{U} \hat{Q}_K \hat{U}^\dagger \hat{Q}_J) \\ &= \text{Tr}(\hat{Q}_J \hat{U} \hat{Q}_K \hat{U}^\dagger) = O_{JK} \end{aligned} \quad (8)$$

On montre plus loin que  $\hat{O}[\hat{U}]$  est une transformation orthogonale unimodulaire (elle est donc régulière), c'est-à-dire que l'on a:

$$\widehat{O}[\hat{U}] = \hat{O}^{-1}[\hat{U}] \quad (9)$$

$$\det \hat{O}[\hat{U}] = +1 \quad (9')$$

On a évidemment:

$$\hat{O}[\hat{I}_n] = \hat{I}_n \quad (10)$$

Il suit de ces propriétés que l'on a:

$$\mathbf{P}'^2 = \mathbf{P}^2 \quad (11)$$

b) Considérons la transformation unitaire  $\hat{U} = \hat{U}_1 \hat{U}_2$ . Il lui correspond la transformation  $\hat{O}[\hat{U}_1 \hat{U}_2]$  d'éléments:

$$\begin{aligned} \hat{O}_{JK}[\hat{U}_1 \hat{U}_2] &= \text{Tr}(\hat{Q}_J \hat{U}_1 \hat{U}_2 \hat{Q}_K \hat{U}_2^\dagger \hat{U}_1^\dagger) \\ &= \text{Tr}(\hat{U}_1^\dagger \hat{Q}_J \hat{U}_1 \hat{U}_2 \hat{Q}_K \hat{U}_2^\dagger). \end{aligned} \quad (12)$$

Les deux matrices hermitiques de trace nulle intervenant sous le symbole trace peuvent être écrites, d'après les propriétés de l'algèbre de Lie  $\mathcal{E}_r$ :

$$\hat{U}_1^\dagger \hat{Q}_J \hat{U}_1 = \sum_L O_{JL}[\hat{U}_1] \hat{Q}_L \quad (13a)$$

$$\hat{U}_2 \hat{Q}_K \hat{U}_2^\dagger = \sum_M O_{MK}[\hat{U}_2] \hat{Q}_M \quad (13b)$$

en posant

$$O_{JL}[\hat{U}_1] = \text{Tr}(\hat{U}_1^\dagger \hat{Q}_J \hat{U}_1 \hat{Q}_L) \quad (14a)$$

$$O_{MK}[\hat{U}_2] = \text{Tr}(\hat{Q}_M \hat{U}_2 \hat{Q}_K \hat{U}_2^\dagger) \quad (14b)$$

définitions conformes à (6).

Il vient alors:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{U}_1 \hat{Q}_J \hat{U}_1 \hat{U}_2 \hat{Q}_K \hat{U}_2^\dagger) &= \sum_{LM} O_{JL}[\hat{U}_1] \hat{O}_{MK}[\hat{U}_2] \text{Tr}(\hat{Q}_L \hat{Q}_M) \\ &= \sum_{LM} O_{JL}[\hat{U}_1] \hat{O}_{MK}[\hat{U}_2] \delta_{LM} \\ &= \sum_L O_{JL}[\hat{U}_1] \hat{O}_{LK}[\hat{U}_2]. \end{aligned} \quad (15)$$

En comparant les relations (12) et (15), on obtient la relation entre matrices (ou opérateurs):

$$\hat{O}[\hat{U}_1 \hat{U}_2] = \hat{O}[\hat{U}_1] \hat{O}[\hat{U}_2] \quad (16)$$

Si  $\hat{U}_2 = \hat{U}_1^{-1}$ , on tire de (16) et (11) que:

$$\hat{O}[\hat{U}^{-1}] = \hat{O}[\hat{U}^+] = \hat{O}^{-1}[\hat{U}]. \quad (17)$$

On peut vérifier maintenant que  $\hat{O}[\hat{U}]$  est orthogonale; en effet, on a:

$$\begin{aligned} (\tilde{O})_{JK} &= O_{KJ} = \text{Tr}(\hat{Q}_K \hat{U} \hat{Q}_J \hat{U}^+) \\ &= \text{Tr}(\hat{U}^+ \hat{Q}_K \hat{U} \hat{Q}_J) = \text{Tr}(\hat{Q}_J \hat{U}^+ \hat{Q}_K \hat{U}) \\ &= O_{JK}[\hat{U}^+] \quad \text{d'après (6)} \\ &= (\hat{O}^{-1})_{JK} \quad \text{d'après (17)}. \end{aligned}$$

c) Les propriétés précédentes montrent que l'ensemble des matrices  $\hat{O}[\hat{U}]$  forme un groupe qui est homomorphe à  $SU(n)$ . Il fournit une représentation réelle orthogonale de  $SU(n)$ .

Il fournit aussi une représentation réelle orthogonale du groupe  $SU(n)/\mathcal{C}_n$  qui est homomorphe à  $SU(n)$ . Le noyau de l'homomorphisme est le groupe cyclique  $\mathcal{C}_n$ , constitué par les  $n$  matrices scalaires:

$$\hat{U}_p = \exp(i\alpha_p) \hat{I}_n$$

où  $\exp(i\alpha_p)$  est une racine  $n^{\text{ième}}$  de l'unité. D'après la formule (6), on voit facilement que:

$$\hat{O}[\hat{U}_p] = \hat{I}_n \quad (18)$$

*Remarques*

Les matrices orthogonales unimodulaires  $\hat{O}[\hat{U}]$  forment un groupe de dimension  $r = n^2 - 1$ , puisque celui-ci possède la même algèbre de Lie que  $SU(n)$ .

On retrouve ainsi la propriété connue [4] que  $SU(n)/\mathcal{C}_n$  est seulement un sous-groupe du groupe orthogonal spécial  $SO(n^2 - 1)$ , puisque celui-ci est de dimension  $\frac{1}{2}(n^2 - 1)(n^2 - 2)$ .

C'est uniquement pour  $n = 2$  que l'on a:

$$SU(2)/\mathcal{C}_2 \approx SO(3).$$

2) Dans l'espace  $\mathcal{E}_n$ , on peut effectuer des changements de  $F$ -bases, c'est-à-dire utiliser des transformations *passives* telles que:

$$\hat{Q}'_J = \sum_K O_{JK} \hat{Q}_K$$

où  $\hat{O} = (O_{JK})$  est une matrice orthogonale pouvant appartenir non seulement à  $SU(n)/\mathcal{C}_n$ , mais également à  $SO(n^2 - 1)$ .

Le même opérateur-densité  $\hat{\rho}$  peut alors être écrit:

$$\hat{\rho} = \sum_j P_j \hat{Q}_j = \sum_j P'_j \hat{Q}'_j$$

où les  $P_j$  et les  $P'_j$  sont les composantes d'un même vecteur  $\mathbf{P}$  de  $\mathcal{E}_n$ .

C'est seulement lorsque  $\hat{O}$  appartient à  $SU(n)/\mathcal{C}_n$  que l'on peut lui faire correspondre une transformation unitaire de  $\mathcal{H}_n$  [en réalité  $n$ , puisque l'homomorphisme  $SU(n) \rightarrow SU(n)/\mathcal{C}_n$  est  $n$  à 1], telle que l'on ait:

$$\hat{Q}'_j = \hat{U} \hat{Q}_j \hat{U}^+$$

$\hat{U}$  est alors une transformation passive de  $\mathcal{H}_n$  (changement de soc).

Les transformations passives de  $\mathcal{E}$ , (ou  $\mathcal{E}_r$ ) (utiles à considérer pour des commodités de calcul) forment donc un groupe plus large que celui constitué par les transformations actives (ayant un sens physique, par exemple une propriété d'évolution).

Cette propriété des transformations passives est liée, en particulier, au fait qu'à partir d'un soc de  $\mathcal{H}_n$ , une base  $\{\hat{Q}_j\}$  de  $\mathcal{E}_r$  peut être obtenue d'une manière qui comporte une large part d'arbitraire.

### 3. Forme Explicite des Opérateurs Orthogonaux Agissant sur $\mathcal{E}_r$ .

a) Si l'on a une  $F$ -base  $\{\hat{Q}_j\}$  pour l'algèbre de Lie  $su(n)$ , on sait que ces opérateurs hermitiques de trace nulle peuvent être utilisés comme des générateurs infinitésimaux du groupe  $SU(n)$ . Il s'en suit que tout opérateur unitaire unimodulaire  $\hat{U}$ , agissant sur  $\mathcal{H}_n$ , peut être écrit sous la forme:

$$\hat{U}(\mathbf{a}) = \exp\left(i \sum_{j=1}^r a_j \hat{Q}_j\right) \tag{19}$$

$$= \exp(i\mathbf{a}\mathbf{Q}) \tag{19'}$$

où les  $a_j$  sont des nombres réels ( $\mathbf{a} \in \mathcal{E}_r$ ).

Compte tenu de la formule (19), les éléments de  $\hat{O}[\hat{U}]$  définis par (6) deviennent:

$$O_{JK}[\hat{U}] = O_{JK}(\mathbf{a}) = \text{Tr}[\hat{Q}_J \exp(i\mathbf{a}\hat{\mathbf{Q}}) \hat{Q}_K \exp(-i\mathbf{a}\hat{\mathbf{Q}})]. \tag{20}$$

b) L'expression (20) peut être transformée à l'aide de la formule de Baker-Campbell-Hausdorff [5]. Toutefois, la matrice  $\hat{O}[\hat{U}]$  peut être obtenue plus directement en remarquant que la transformation

$$\hat{\rho} \rightarrow \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^+, \quad \hat{U} \in SU(n)$$

peut fournir la représentation adjointe de  $SU(n)$ , de dimension  $r$  [6].

Les générateurs de cette représentation forment une base de la représentation adjointe de l'algèbre de Lie  $su(n)$  ( $\mathcal{E}_r$  est l'espace porteur de ces représentations).

c) Dans la  $F$ -base  $\{\hat{Q}_j\}$ , la représentation adjointe de  $su(n)$  est constituée par les matrices (de rang  $r$ )

$$\hat{\Gamma}_J = (C_{KJL}), \quad J = 1 \rightarrow r. \tag{21}$$

L'indice variable  $K$  numérote les lignes de  $\hat{\Gamma}_J$ , l'indice variable  $L$  ses colonnes, tandis que l'indice fixe  $J$  différencie les matrices  $\hat{\Gamma}_J$  entre elles.

Les nombres réels  $C_{KJL}$  sont les constantes de structure de  $su(n)$ , définies par les relations de commutation:

$$i[\hat{Q}_J, \hat{Q}_L] = \sum_K C_{KJL} \hat{Q}_K \quad (22)$$

d'où

$$C_{KJL} = \text{Tr} (i\hat{Q}_K [\hat{Q}_J, \hat{Q}_L]). \quad (23)$$

On montre facilement que la constante de structure  $C_{KJL}$  est complètement antisymétrique par rapport à ses trois indices.

Les matrices  $\hat{\Gamma}_J$  obéissent aux mêmes relations que les  $\hat{Q}_J$ , à condition de remplacer les opérations sur  $\mathcal{H}_n$  (trace, commutateur  $\times i$ ) par des opérations analogues sur  $\mathcal{E}$ , (trace, commutateur). On a ainsi:

$$\text{Tr} (\hat{\Gamma}_J) = 0 \quad (24a)$$

$$\text{Tr} (\hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_K) = \delta_{JK} - 2i \delta_{JK} \quad (24b)$$

(trace calculée sur  $\mathcal{E}$ .)

$$[\hat{\Gamma}_J, \hat{\Gamma}_L] = \sum_K C_{KJL} \hat{\Gamma}_K. \quad (24c)$$

d) Compte tenu des résultats rappelés ci-dessus, l'opérateur  $\hat{O}[\hat{U}(\mathbf{a})]$  peut être écrit:

$$\hat{O}[\hat{U}(\mathbf{a})] = \hat{O}(\mathbf{a}) = \exp \left( \sum_J a_J \hat{\Gamma}_J \right) \quad (25)$$

$$= \exp (\mathbf{a} \hat{\Gamma}). \quad (25')$$

Ce résultat exprime l'isomorphisme qui existe entre la représentation fondamentale  $\{\hat{Q}_J\}$  de  $su(n)$  et sa représentation adjointe  $\{\hat{\Gamma}_J\}$ .

Le caractère unimodulaire de  $\hat{O}(\mathbf{a})$  mentionné plus haut [formule (9')], découle du fait que les générateurs  $\hat{\Gamma}_J$  sont de trace nulle.

*Remarque*

Seules les matrices orthogonales qui peuvent être écrites de la manière (25), à l'aide des  $r = n^2 - 1$  générateurs  $\hat{\Gamma}_J$ , correspondent à des transformations unitaires de  $\mathcal{H}_n$ .

**4. Application à l'Évolution de l'Opérateur-Densité**

a) On suppose que l'évolution de l'opérateur-densité peut être décrite par la relation intégrale:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^+(t, t_0) \quad (26)$$

où l'opérateur unitaire  $\hat{U}(t, t_0)$  est l'opérateur d'évolution dans  $\mathcal{H}_n$ .

La formule (26) est un cas particulier de (4), de sorte que l'on peut remplacer cette relation par une équation d'évolution dans  $\vec{\mathcal{E}}_m$  soit:

$$\mathbf{P}(t) = \hat{O}[\hat{U}(t, t_0)]\mathbf{P}(t_0). \quad (27)$$

Du caractère orthogonal de  $\hat{O}[\hat{U}(t, t_0)]$  découle immédiatement la propriété de conservation:

$$\mathbf{P}^2(t) = \mathbf{P}^2(t_0) \quad (28)$$

cas particulier de (11).

En dérivant la formule (27) par rapport au temps, on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \mathbf{P}(t_0) = \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \hat{O}^{-1} \mathbf{P}(t) \\ &= \hat{\Omega}(t, t_0) \mathbf{P}(t) \end{aligned} \quad (29)$$

en posant:

$$\hat{\Omega}(t, t_0) = \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \hat{O}^{-1} = \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \hat{\mathcal{O}}. \quad (29')$$

$\hat{\Omega}(t, t_0)$  est réelle et antisymétrique; en effet, de  $\hat{O}\hat{\mathcal{O}} = \hat{I}$ , découle que l'on a:

$$\frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \hat{\mathcal{O}} = -\hat{O} \frac{\partial \hat{\mathcal{O}}}{\partial t}$$

d'où

$$\hat{\tilde{\Omega}} = \frac{\partial \hat{\mathcal{O}}}{\partial t} \hat{\mathcal{O}} = \hat{O} \frac{\partial \hat{\mathcal{O}}}{\partial t} = -\frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \hat{\mathcal{O}} = -\hat{\Omega}. \quad (29'')$$

b) Pour un système conservatif dont l'hamiltonien est  $\hat{H}$ , l'opérateur d'évolution peut être écrit:

$$\hat{U}(t-t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0) \right]. \quad (30)$$

En écrivant l'hamiltonien sous la forme (2), soit:

$$\hat{H} = \sum_j H_j \hat{Q}_j = \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{Q}} \quad (31)$$

[on peut négliger le terme proportionnel à  $\hat{I}$  qui n'introduit dans (30) qu'un facteur de phase], le relation (3) devient:

$$\hat{U}(t-t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (t-t_0) \sum_j H_j \hat{Q}_j \right] \quad (32)$$

cas particulier de (19).

On peut alors appliquer la formule générale (25) pour obtenir l'opérateur d'évolution sur  $\bar{\mathcal{E}}_m$  soit:

$$\hat{O}(t-t_0) = \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} (t-t_0) \sum_J H_J \hat{\Gamma}_J \right] \quad (33)$$

$$= \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} (t-t_0) \mathbf{H} \cdot \hat{\Gamma} \right]. \quad (33')$$

L'équation d'évolution (27) devient:

$$\mathbf{P}(t) = \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} (t-t_0) \mathbf{H} \cdot \hat{\Gamma} \right] \mathbf{P}(t_0) \quad (34)$$

ou, sous forme différentielle,

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar} (\mathbf{H} \cdot \hat{\Gamma}) \mathbf{P}(t) \quad (35)$$

$$= \hat{\Omega} \mathbf{P}(t). \quad (35')$$

La formule (35') est un cas particulier de (29). La matrice d'évolution [2]:

$$\hat{\Omega} = -\frac{1}{\hbar} \mathbf{H} \hat{\Gamma} \quad (36)$$

est bien antisymétrique, puisque les matrices  $\hat{\Gamma}_J$  le sont.

*Remarques*

1) D'après la relation (24c), on a:

$$H_J = \frac{\hbar}{2i} \text{Tr} (\hat{\Omega} \hat{\Gamma}_J) \quad (37)$$

ce qui fournit une autre expression de  $H_J$ , calculée à partir de la représentation adjointe, tandis que l'expression:

$$H_J = \text{Tr} (\hat{H} \hat{Q}_J)$$

est calculée à partir de la représentation fondamentale introduite dans l'article précédent.

$\hat{\Omega}$  peut être considéré comme l'hamiltonien agissant sur  $\bar{\mathcal{E}}_m$ .

2) La formule (34) est la solution de l'équation différentielle vectorielle (35). On peut la retrouver à l'aide de la théorie des systèmes d'équations différentielles [7].

c) Dans le cas d'un système non-conservatif pour lequel on peut introduire un hamiltonien dépendant du temps  $\hat{H}(t)$ , on sait que l'opérateur d'évolution, sous réserve de questions de convergence, peut être écrit sous la forme [8]:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{C} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau \right] \quad (38)$$

où  $\hat{C}$  est l'opérateur chronologique de Dyson [que l'on peut ici considérer comme un rappel de la manière d'opérer correctement le développement en série symbolisé par (38)].

$\hat{H}(t)$  peut toujours être écrit:

$$\hat{H}(t) = \sum_J H_J(t) \hat{Q}_J$$

et la relation (38) peut donc être réécrite:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{C} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \sum_J \hat{Q}_J \int_{t_0}^t \hat{H}_J(\tau) d\tau \right]. \quad (38')$$

Les considérations qui permettent d'obtenir (38) à partir de l'équation différentielle d'évolution dans  $\mathcal{H}_n$ , sont applicables à l'intégration de l'équation différentielle d'évolution (35) dans  $\mathcal{E}$ , [dans le cas où  $\hat{\Omega}$  dépend du temps], de sorte que la solution de (35) peut être écrite:

$$\mathbf{P}(t) = \hat{O}(t, t_0) \mathbf{P}(t_0) \quad (38'')$$

avec

$$\hat{O}(t, t_0) = \hat{C} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \sum_J \hat{\Gamma}_J \int_{t_0}^t H_J(\tau) d\tau \right] \quad (39)$$

$$= \hat{C} \exp \left[ \int_{t_0}^t \hat{\Omega}(\tau) d\tau \right]. \quad (39')$$

### 5. Perturbations Dépendant du Temps

Les résultats généraux précédents peuvent être appliqués au cas d'un système  $S_0$  soumis à une perturbation dépendant du temps, dont l'hamiltonien a la forme:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{V}(t). \quad (40)$$

a) Il est commode d'utiliser la description d'interaction dans laquelle les observables (notées  $\hat{G}$  dans la description de Schrödinger et  $\hat{\tilde{G}}$  dans la description d'interaction) dépendent du temps de la manière suivante:

$$\hat{\tilde{G}}(t) = \hat{U}^{(0)*} \hat{G} \hat{U}^{(0)} \quad (41)$$

avec

$$\hat{U}^{(0)} = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t \right] \quad (41')$$

tandis que l'évolution de l'opérateur-densité est régie par l'équation:

$$i \hbar \frac{\partial \vec{\rho}}{\partial t} = \lambda [\vec{V}, \vec{\rho}]. \quad (42)$$

b) En posant:

$$\hat{V} = \frac{\text{Tr} \hat{V}}{n} \hat{I} + \mathbf{V}(t) \hat{\mathbf{Q}}$$

un calcul identique à celui effectué au paragraphe 4b [voir formule (34)] fournit le vecteur  $\bar{V}(t)$ , soit:

$$\bar{V}(t) = \exp \left[ + \frac{1}{\hbar} t \mathbf{H}^{(0)} \hat{\Gamma} \right] \mathbf{V}(t). \quad (43)$$

c) L'équation d'évolution (42) dans  $\mathcal{H}_n$  peut être remplacée par l'équation d'évolution correspondante dans  $\bar{\mathcal{H}}_m$  soit:

$$\frac{d\bar{P}(t)}{dt} = \lambda \bar{\Omega}(t) \bar{P}(t) \quad (44)$$

où la matrice antisymétrique  $\bar{\Omega}(t)$  est définie à partir de  $\bar{V}(t)$  par une relation analogue à (36), soit:

$$\begin{aligned} \bar{\Omega} &= -\frac{1}{\hbar} \sum_J \bar{V}_J(t) \hat{\Gamma}_J \\ &= -\frac{1}{\hbar} \bar{V}(t) \hat{\Gamma}. \end{aligned} \quad (45)$$

La solution formelle de (44) est alors, par analogie avec (38) et (39),

$$\bar{P}(t) = \hat{C} \exp \left[ + \lambda \int_0^t \bar{\Omega}(\tau) d\tau \right] \bar{P}(0). \quad (46)$$

d) Cette relation peut être utilisée comme point de départ pour un calcul de perturbation par rapport au paramètre  $\lambda$ , en écrivant:

$$\bar{P}(t) = \bar{P}^{(0)}(t) + \lambda \bar{P}^{(1)}(t) + \lambda^2 \bar{P}^{(2)}(t) + \dots \quad (47)$$

On peut prendre les conditions initiales ( $t_0 = 0$ )

$$\bar{P}^{(0)}(0) = P^{(0)}(0). \quad (48a)$$

$$\bar{P}^{(n)}(0) = 0. \quad (48b)$$

#### Remarque

La relation (48a) est un cas particulier de la relation

$$\bar{P}^{(0)}(t) = P^{(0)}(0)$$

qui découle de (43) et du fait que l'évolution de  $P^{(0)}(t)$  est régie par l'hamiltonien non-perturbé  $\hat{H}^{(0)}$ .

En développant la formule (46) suivant les règles de Dyson [8], on obtient ainsi, par exemple pour les deux premiers ordres:

$$\bar{P}^{(1)}(t) = \int_0^t d\tau \bar{\Omega}(\tau) P^{(0)}(0) \quad (49a)$$

$$\bar{P}^{(2)}(t) = \int_0^t dt' \int_0^{t'} d\tau \bar{\Omega}(t') \bar{\Omega}(\tau) P^{(0)}(0) \quad (49b)$$

Pour rappeler le caractère très "condensé" de telles expressions vectorielles, nous pouvons développer l'expression de la composante  $J$  de (49b), soit:

$$\bar{P}_J^{(2)}(t) = \sum_K \int_0^t dt' \int_0^{t'} d\tau (\bar{\Omega}(t') \bar{\Omega}(\tau))_{JK} P_K^{(0)}(0). \quad (49b')$$

En tenant compte des définitions (45) et (21), on a:

$$\begin{aligned} (\bar{\Omega}(t') \bar{\Omega}(\tau))_{JK} &= \sum_L \bar{\Omega}_{JL}(t') \bar{\Omega}_{LK}(\tau) \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{LMN} \bar{V}_M(t') (\hat{\Gamma}_M)_{JL} \bar{V}_N(\tau) (\hat{\Gamma}_N)_{LK} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{LMN} C_{JML} C_{LNK} \bar{V}_K(t') \bar{V}_N(\tau). \end{aligned} \quad (50)$$

Des simplifications sont introduites par l'antisymétrie des constantes de structure.

### Bibliographie

- [1] J. Tillieu et A. Van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* **23**, 1807 (1983).
- [2] U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 74 (1957).
- [3] F. T. Hioe et J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 838 (1981).
- [4] Voir, par exemple, H. Bacry, *Leçons sur la théorie des groupes et les symétries des particules élémentaires* (Gordon-Breach-Dunod, 1967), Chap. 5.
- [5] J. G. F. Belinfante et B. Kolman, *A Survey of Lie Groups and Lie Algebras* (Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1972), p. 47.
- [6] H. Boerner, *Representations of groups* (North-Holland, Amsterdam, 1970), p. 89.
- [7] V. Arnold, *Equations différentielles ordinaires* (Editions de Moscou, traduction française, 1974).
- [8] S. S. Schweber, *An introduction to relativistic quantum field theory* (Row, Peterson and Co, 1961), p. 330 et sq.

Received June 8, 1982

Accepted for publication October 21, 1982

b) OBTENTION DE CONSTANTES DU MOUVEMENT

Nous pouvons maintenant utiliser les propriétés d'évolution établies dans II pour obtenir des constantes du mouvement. En mécanique quantique, il est possible de définir la dérivée totale d'une observable par

$$\frac{d\hat{G}}{dt} = \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{G}] \quad (8)$$

Nous nommerons constantes du mouvement structurelles les opérateurs pour lesquels cette dérivée totale est nulle. Leur valeur moyenne est alors constante dans n'importe quel état. L'équation (8) est également vérifiée par les opérateurs-densités. Dans l'article II, nous avons appelé constantes du mouvement conjoncturelles de tels opérateurs qui dépendent de l'état du système. Certaines d'entre elles, les  $\hat{\rho}^q$ , ont été déjà utilisées [HIOE,81] pour obtenir les restrictions imposées aux états qui peuvent provenir d'un état donné par une évolution hamiltonienne, quel que soit le hamiltonien utilisé. Dans le cas où il existe un hamiltonien, l'évolution du système de  $t_0$  à  $t_1$  est décrite par un opérateur  $\hat{U}(t_1, t_0)$

$$\hat{\rho}(t_1) = \hat{U}(t_1, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{-1}(t_1, t_0)$$

Parmi toutes les évolutions imaginables, cette transformation est très particulière, puisque pour une fonction quelconque  $f$  elle entraîne une relation semblable.

$$f(\hat{\rho}(t_1)) = \hat{U}(t_1, t_0) f(\hat{\rho}(t_0)) \hat{U}^{-1}(t_1, t_0)$$

Par exemple, l'évolution impliquée par les équations de Redfield n'a pas cette propriété. Ce qui revient à écrire : pour toute fonction  $f$ , la grandeur  $f(\hat{\rho})$  est une constante du mouvement conjoncturelle. Une telle constante du mouvement conjoncturelle sera par exemple  $\hat{\rho} \ln \hat{\rho}$  qui sert à définir l'entropie du système  $S_Q$ .

Dans la suite de l'article III, nous obtenons directement, à partir des vecteurs de cohérence, des constantes du mouvement conjoncturelles dans le cas où le hamiltonien n'est pas quelconque, mais

appartient à une sous-algèbre  $su(m)$  de  $su(n)$ . L'espace  $\mathcal{E}_r$  des vecteurs de cohérence est alors décomposé en somme directe de plusieurs sous-espaces. La projection du vecteur de cohérence dans certains de ces sous-espaces concerne un module constant. Lorsque le hamiltonien est donné et indépendant du temps, il engendre une sous-algèbre  $su(1)$ . Les constantes du mouvement sont les projections du vecteur de cohérence dans les sous-espaces de  $\mathcal{E}_r$  associés aux valeurs propres du hamiltonien. La décomposition associée aux sous-algèbres  $su(n)$  n'apporte pas beaucoup de simplifications dans ce cas.

Lorsque l'on a un ensemble de hamiltoniens dépendant de paramètres (éventuellement le temps), il peut arriver que la sous-algèbre engendrée par cet ensemble soit une sous-algèbre  $su(m)$  avec  $m < n$ . Dans ce cas, la construction décrite dans l'article permet d'obtenir certaines constantes du mouvement.

## Usage de l'Algèbre de Lie $su(n)$ dans l'Étude des Systèmes Quantiques à $n$ États. III. Définition et Obtention des Constantes du Mouvement Conjoncturelles

JACQUES TILLIEU ET AUGUSTIN VAN GROENENDAEL

*Laboratoire de Physique Théorique, Université de Lille, F-59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France*

### Resume

A partir de l'opérateur-densité d'un système quantique à  $n$  états, sont définies et calculées des constantes du mouvement pour lesquelles est proposée l'appellation nouvelle de conjoncturelles. On établit qu'il en existe au maximum  $n-1$  linéairement indépendantes. A l'aide des sous-algèbres  $su(m)$  ( $m < n$ ), on montre comment il est possible d'introduire, suivant la forme de l'hamiltonien, des constantes du mouvement conjoncturelles reliées aux composantes du vecteur de cohérence.

### Abstract

From the density operator, some constants of the motion are defined and established. We suggest calling them conjunctural constants of the motion. It is proved that no more than  $n-1$  of them can be linearly independent. Using  $su(m)$  ( $m < n$ ) subalgebra associated with the Hamiltonian-operator, it is shown how conjunctural constants of the motion can be expressed in terms of the coherence vector components.

### 1. Introduction

Dans deux articles précédents, notés I [1] et II [2], nous avons montré l'intérêt d'introduire, pour étudier les propriétés instantanées et l'évolution d'un système quantique  $\mathcal{S}_Q$  susceptible d'exister dans  $n$  états, une algèbre de Lie réelle  $\mathcal{E}_r$ , isomorphe à  $su(n)$ , de dimension  $r = n^2 - 1$ , et, conjointement, un espace vectoriel réel  $\mathcal{E}_r$ .

L'opérateur-densité décrivant un état de  $\mathcal{S}_Q$  peut alors être écrit:

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{n} \hat{I} + \sum_{j=1}^r P_j(t) \hat{Q}_j \quad (1)$$

$$= \frac{1}{n} \hat{I} + \mathbf{P}(t) \hat{\mathbf{Q}}. \quad (1a)$$

$\mathbf{P}(t)$  est un vecteur mobile, appelé parfois vecteur de cohérence [3], appartenant à  $\mathcal{E}_r$  [2]. L'ensemble  $\{\hat{Q}_j\}$  est une  $F$ -base de  $\mathcal{E}_r$ , ou base orthonormée au sens de Fano [1], qui est ici *une base fixe dans  $\mathcal{E}_r$* .

On sait, d'autre part, que la détermination de constantes du mouvement est toujours une part importante et intéressante de l'étude d'un système physique.

Après quelques considérations générales sur les constantes du mouvement (CM), nous nous proposons, dans cet article, d'introduire une catégorie particulière de CM, appelées *conjoncturelles* et de montrer comment l'usage des propriétés de  $su(n)$  et de ses sous-algèbres de Lie permet leur obtention.

## 2. Constantes du Mouvement Structurelles et Conjoncturelles

Nous supposons que le système quantique  $\mathcal{S}_Q$  est dans un état (pur ou mélangé) décrit par l'opérateur-densité  $\hat{\rho}(t)$ , et que l'évolution de celui-ci est causale et régie par l'équation

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (2)$$

où  $\hat{H} = \hat{H}(t)$  est l'hamiltonien du système.

Par définition, une observable  $\hat{G}$  est une constante du mouvement si la valeur moyenne de sa dérivée temporelle totale est nulle, quel que soit l'état de  $\mathcal{S}_Q$ . Elle obéit alors à la relation

$$\frac{d\hat{G}}{dt} = \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{G}] = 0 \quad (3)$$

Nous appellerons une telle grandeur, indépendante de l'état de  $\mathcal{S}_Q$  et dépendant seulement de  $\hat{H}$ , une *CM structurelle*.

Le plus souvent, on ne considère que des CM ne dépendant pas explicitement du temps, c'est-à-dire que l'on a simultanément

$$\frac{\partial \hat{G}}{\partial t} = 0, \quad (4a)$$

$$[\hat{H}, \hat{G}] = 0. \quad (4b)$$

Nous appellerons une telle grandeur, une *CM structurelle restreinte*.

Il est intéressant de constater—fait peu signalé dans la littérature—que l'opérateur-densité  $\hat{\rho}$  obéit à une équation du type (3), puisque Eq. (2) peut être réécrite

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0. \quad (5)$$

Il s'en suit que l'on peut considérer l'opérateur-densité comme une CM de  $\mathcal{S}_Q$ , et même comme une *CM dépendant explicitement du temps*, puisque, sauf pour les états stationnaires,  $\partial \hat{\rho} / \partial t \neq 0$ .

Cette CM et celles que l'on peut en déduire [ $\hat{\rho}^2, \hat{\rho}^3, \dots$ , par exemple et, de manière générale, toute fonction  $f(\hat{\rho})$ ] seront appelées des *CM conjoncturelles* puisque dépendant, de manière évidente, de l'état du système. Le plus souvent,  $\hat{\rho}$  ne commute pas avec  $\hat{H}$ .

**Remarque.** La distinction que nous proposons entre CM structurelles et CM conjoncturelles est nette pour les opérateurs. Elle s'estompe pour les grandeurs susceptibles de recevoir un sens expérimental (valeurs moyennes et distributions

de probabilités), puisque, pour la CM structurelle  $\hat{G}$ , on a, par exemple, la CM numérique

$$\langle \hat{G} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{G}) = C^{\text{te}}, \quad (6)$$

c'est-à-dire que l'état  $\hat{\rho}$  intervient évidemment pour déterminer la valeur numérique  $\langle \hat{G} \rangle$ .

### 3. CM Conjoncturelles et Valeurs Propres de $\hat{\rho}$ - $F$ -Bases Mobiles

Dans la suite de cet article, nous nous bornons à étudier divers ensembles (non indépendants) de CM conjoncturelles, en envisageant d'abord celles dont l'obtention découle simplement et directement de la connaissance de l'état  $\hat{\rho}$  et ne réclame pas celle de l'hamiltonien, comme il est nécessaire pour les CM structurelles. Corrélativement, nous introduisons quelques considérations sur les  $F$ -bases fixes ou mobiles dans  $\mathcal{E}_r$ .

Le caractère de CM des opérateurs  $\hat{\rho}$ ,  $\hat{\rho}^2, \dots, \hat{\rho}^p$  entraîne aussi la constance, au cours du temps, de valeurs numériques réelles, puisque l'on a, d'après Eq. (5)

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \langle I \rangle = 1, \quad (7a)$$

$$\text{Tr} \hat{\rho}^2 = \langle \hat{\rho} \rangle, \quad (7b)$$

$$\text{Tr} \hat{\rho}^p = \langle \hat{\rho}^{p-1} \rangle, \quad (7c)$$

et ces valeurs peuvent être considérées comme purement conjoncturelles.

On obtient ainsi, de manière simple et systématique, des CM numériques dont certaines ont déjà été signalées par des auteurs précédents [3, 4]. Leur existence découle d'ailleurs du fait fondamental que les valeurs propres de  $\hat{\rho}(t)$  sont indépendantes du temps; en effet, en supposant l'existence d'un opérateur unitaire d'évolution [2] et en utilisant la décomposition spectrale de  $\hat{\rho}(t_0)$ , on peut écrire

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \\ &= \sum_j \rho_j \hat{U}(t, t_0) \hat{P}_j(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \\ &= \sum_j \rho_j \hat{P}_j(t). \end{aligned}$$

$\hat{\rho}(t)$  possède donc des valeurs propres  $\rho_j$  constantes et des projecteurs propres  $\hat{P}_j(t)$  mobiles.

On a alors

$$\text{Tr} \hat{\rho}^p = \sum_j \rho_j^p = C^{\text{te}}. \quad (8)$$

En combinant de manière arbitraire les  $\rho_j$ , il est évidemment possible d'obtenir bien d'autres CM numériques mais ce genre d'opération ne présente pas, la plupart du temps, d'intérêt physique.

Dans le cas d'un système  $\mathcal{S}_Q$  à  $n$  états, il y a au maximum  $n - 1$  opérateurs  $\hat{\rho}^p$  linéairement indépendants (dans  $\mathcal{E}_r$ ); ceci découle du théorème de Hamilton-Cayley pour les opérateurs d'un espace vectoriel de dimension finie [5].

**Cas particuliers intéressants.**

(a) Pour un *état pur*, on a  $\hat{\rho}^p = \hat{\rho}$ ,  $\forall p$ , de sorte qu'il n'y a qu'une seule CM conjoncturelle indépendante.

(b) Pour un état complètement aléatoire (complètement "dépolarisé")

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} \hat{I},$$

$$\hat{\rho}^p = \frac{1}{n^p} \hat{I}.$$

(c) Une sous-algèbre de Cartan peut être obtenue à l'aide des projecteurs propres de  $\hat{\rho}(t)$ . En effet, on peut construire, à partir des vecteurs propres de  $\hat{\rho}(t)$ , par le procédé indiqué dans I, une *F-base* de  $\mathcal{E}$ , qui est une base mobile, que nous désignerons par  $\{\hat{R}_J(t)\}$  ( $J = 1 \rightarrow n^2 - 1$ ). L'opérateur-densité peut alors être écrit sous la forme

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} \hat{I} + \sum_{J=1}^{n^2-1} P_J \hat{R}_J(t). \tag{9}$$

Les  $\hat{R}_J(t)$  sont les éléments d'une "sous-base" de  $\{\hat{R}_J(t)\}$  dont la numérotation peut être choisie telle que  $\bar{J} = 1 \rightarrow n - 1$ .

Les nombres réels  $P_J$  peuvent être exprimés à partir des valeurs propres  $\rho_j$  de  $\hat{\rho}(t)$  et sont donc aussi des CM numériques conjoncturelles. Les  $\hat{R}_J(t)$  sont mobiles dans  $\mathcal{E}_r$ , commutent entre eux et forment une *F-base* d'une sous-algèbre de Cartan de  $\mathcal{E}_r$ , qui est "mobile" dans  $\mathcal{E}_r$ .

(d) L'usage de la *F-base* mobile  $\{\hat{R}_J(t)\}$  dans  $\mathcal{E}_r$  entraîne que le vecteur  $\mathbf{P}$  correspondant [voir formule (1a)] est fixe dans  $\mathcal{E}_r$  (il a les composantes  $P_J$  constantes pour  $J = \bar{J} = 1 \rightarrow n - 1$ , et nulles pour  $J = n \rightarrow n^2 - 1$ ).

De manière générale, au lieu de la relation (1) où l'on utilise une *F-base fixe*  $\{\hat{Q}_J\}$ , on peut écrire

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \\ &= \frac{1}{n} \hat{I} + \sum_J P_J(t_0) \hat{Q}_J(t), \end{aligned} \tag{10}$$

en posant

$$\hat{Q}_J(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{Q}_J \hat{U}^\dagger(t, t_0), \tag{10a}$$

c'est-à-dire que la transformation  $\hat{U}(t, t_0)$  envisagée dans II comme une transformation active, peut aussi être envisagée comme une transformation passive et fournir, de manière générale, une *F-base mobile*  $\{\hat{Q}_J(t)\}$ , dans laquelle les composantes  $P_J(t_0)$  de  $\hat{\rho}(t)$  sont alors des CM numériques. La base  $\{\hat{R}_J(t)\}$ , considérée plus haut, est une base mobile particulière.

Nous avons montré, dans II, qu'aux transformations unitaires  $\hat{U}$  de  $\mathcal{H}_n$ , correspondent des transformations orthogonales réelles  $\hat{O}[\hat{U}]$  de  $\mathcal{E}$ , ou  $\mathcal{E}_r$ . Nous

avons également signalé que l'on peut envisager des transformations (passives)  $\hat{O}$  de  $\mathcal{E}$ , ou  $\tilde{\mathcal{E}}$ , qui ne correspondent pas à des transformations unitaires de  $\mathcal{H}_n$ . Il peut être intéressant de les considérer à propos de l'équation d'évolution dans  $\tilde{\mathcal{E}}$ , soit formule [II, Eq. (9)]

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \hat{\Omega}(t)\mathbf{P}(t). \quad (11a)$$

Posons

$$\mathbf{P}(t) = \hat{O}(t)\mathbf{P}'(t), \quad (12)$$

où  $\hat{O}(t)$  est une transformation orthogonale (passive) de  $\mathcal{E}$ , ou  $\tilde{\mathcal{E}}$ , dépendant du temps, qui permet d'introduire dans  $\mathcal{E}$ , une  $F$ -base mobile dont le mouvement n'est pas nécessairement régi par l'hamiltonien de  $\mathcal{S}_Q$ .

On trouve facilement que le vecteur  $\mathbf{P}'(t)$  obéit à l'équation d'évolution:

$$\frac{d\mathbf{P}'}{dt} = \hat{\Omega}'(t)\mathbf{P}'(t), \quad (11b)$$

avec

$$\hat{\Omega}'(t) = \tilde{O}(t)\hat{\Omega}(t)\hat{O}(t) - \tilde{O}(t)\frac{\partial\hat{O}}{\partial t}. \quad (13)$$

$\hat{\Omega}'(t)$  est bien antisymétrique, comme  $\hat{\Omega}(t)$  [2].

En particulier, le vecteur  $\mathbf{P}'(t)$  est constant si l'on a  $\hat{\Omega}'(t) = 0$ , soit [II, Eq. (29')]

$$\frac{\partial\hat{O}}{\partial t} = \hat{\Omega}(t)\hat{O}(t). \quad (14)$$

On retrouve alors la  $F$ -base mobile (11a) dont le mouvement est régi par l'hamiltonien de  $\mathcal{S}_Q$ .

#### 4. Conséquences de l'Existence d'Une Sous-Algèbre de Lie pour l'Evolution du Vecteur de Cohérence

Dans le paragraphe précédent, nous avons établi l'existence d'un maximum de  $n-1$  CM conjoncturelles linéairement indépendantes et montré la possibilité d'en déduire des CM numériques ne dépendant que de l'état  $\hat{\rho}$ . Nous allons maintenant chercher des CM conjoncturelles construites à l'aide des composantes du vecteur de cohérence et nous devons, pour cela, faire intervenir l'hamiltonien  $\hat{H}$  de  $\mathcal{S}_Q$ ; ceci introduit donc un aspect plus particulier par rapport aux résultats de la Section 3 où seule la dimension de  $\mathcal{H}_n$  est prise en considération.

Dans II, nous avons obtenu l'équation d'évolution (11) pour le vecteur de cohérence. La matrice d'évolution dans  $\tilde{\mathcal{E}}$ , peut être écrite (dans une base fixe) [voir II, formules (29), (33), (33'), (35), et (36')]

$$\hat{\Omega} = -\frac{1}{\hbar}\mathbf{H}(t)\hat{\Gamma} = -\frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{n^2-1} H_j(t)\hat{\Gamma}_j. \quad (15)$$

Les matrices  $\hat{\Gamma}_J$  sont des matrices réelles antisymétriques de dimension  $r$ , définies par

$$\hat{\Gamma}_J = (C_{KJL}),$$

où les  $C_{KJL}$  sont les constantes de structure de  $su(n)$ , pour la  $F$ -base  $\{\hat{Q}_J\}$  [voir II, Eq. (24)].

Nous allons examiner quelques conséquences générales pour l'équation (11), de l'existence de  $su(m)$  comme sous-algèbre de Lie de  $su(n)$  ( $m < n$ ).

Choisissons une  $F$ -base (fixe) de  $su(n)$  telle que  $\{\hat{Q}_\alpha\}$  soit une  $F$ -base de  $su(m)$  ( $\alpha, \beta = 1 \rightarrow q = m^2 - 1$ ). On peut écrire la base de  $su(n)$ :

$$\{\hat{Q}_J\} = \{\hat{Q}_\alpha, \hat{Q}_L\}, \quad \alpha = 1 \rightarrow q, \quad L = q + 1 \rightarrow r.$$

Dans ces conditions, les constantes de structure de  $su(n)$  sont telles que

$$C_{L\alpha\beta} = 0. \quad (16)$$

Avec cette  $F$ -base adaptée à l'existence de la sous-algèbre  $su(m)$ , en utilisant les conditions d'antisymétrie pour les  $C_{JKL}$  [voir II, Eq. (23)], les matrices  $\hat{\Gamma}_J$  ont les formes suivantes:

$$\hat{\Gamma}_\alpha = \left( \begin{array}{c|c} (C_{\beta\alpha\gamma}) & (C_{\beta\alpha M}) \\ \hline (C_{L\alpha\gamma}) & (C_{L\alpha M}) \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c|c} \hat{\gamma}_\alpha^{(1)} & 0 \\ \hline 0 & \hat{\gamma}_\alpha^{(2)} \end{array} \right), \quad (17)$$

où  $\hat{\gamma}_\alpha^{(1)}$  est une matrice carrée antisymétrique de dimension  $q$ , et  $\hat{\gamma}_\alpha^{(2)}$  une matrice carrée antisymétrique de dimension  $r - q$  ( $\alpha = 1 \rightarrow q$ ),

$$\hat{\Gamma}_L = \left( \begin{array}{c|c} (C_{\alpha L\beta}) & (C_{\alpha LN}) \\ \hline (C_{ML\beta}) & (C_{MLN}) \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c|c} 0 & \hat{\gamma}_L^{(1)} \\ \hline -\hat{\gamma}_L^{(1)} & \hat{\gamma}_L^{(2)} \end{array} \right). \quad (18)$$

$\hat{\gamma}_L^{(2)}$  est encore une matrice carrée antisymétrique de dimension  $r - q$ , tandis que  $\hat{\gamma}_L^{(1)}$  est une matrice rectangulaire à  $q$  lignes et  $r - q$  colonnes ( $L = q + 1 \rightarrow r$ ).

La matrice d'évolution peut alors être écrite

$$\hat{\Omega} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha=1}^q H_\alpha(t) \hat{\Gamma}_\alpha - \frac{1}{\hbar} \sum_{L=q+1}^r H_L(t) \hat{\Gamma}_L. \quad (19a)$$

En écrivant le vecteur de cohérence sous la forme correspondante

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{p}^{(1)} \\ \mathbf{p}^{(2)} \end{pmatrix},$$

où  $\mathbf{p}^{(1)}$  a les  $q$  composantes  $p_\alpha$ ,  $\mathbf{p}^{(2)}$  les  $r - q$  composantes  $p_L$ , on peut écrire

$$\hat{\Omega} \mathbf{P} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha} H_\alpha(t) \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_\alpha^{(1)} & \mathbf{p}^{(1)} \\ \hat{\gamma}_\alpha^{(2)} & \mathbf{p}^{(2)} \end{pmatrix} - \frac{1}{\hbar} \sum_L H_L(t) \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_L^{(1)} & \mathbf{p}^{(2)} \\ -\hat{\gamma}_L^{(1)} & \mathbf{p}^{(1)} + \hat{\gamma}_L^{(2)} \mathbf{p}^{(2)} \end{pmatrix},$$

de sorte que l'on peut séparer, de manière générale, l'équation (11) en deux équations d'évolution "partielles" mais couplées:

$$\frac{d\mathbf{p}^{(1)}}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha} H_{\alpha}(t) \hat{\gamma}_{\alpha}^{(1)} \mathbf{p}^{(1)} - \frac{1}{\hbar} \sum_L H_L(t) \hat{\gamma}_L^{(1)} \mathbf{p}^{(2)}, \quad (19b)$$

$$\frac{d\mathbf{p}^{(2)}}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha} H_{\alpha}(t) \hat{\gamma}_{\alpha}^{(2)} \mathbf{p}^{(2)} - \frac{1}{\hbar} \sum_L H_L(t) (-\hat{\gamma}_L^{(1)} \mathbf{p}^{(1)} + \gamma_L^{(2)} \mathbf{p}^{(2)}). \quad (19c)$$

Si l'opérateur hamiltonien appartient à  $su(n)$ , on a

$$H_L(t) = 0, \quad \forall L = q+1 \rightarrow r$$

et les deux équations (19) deviennent

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{p}^{(1)}}{dt} &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha} H_{\alpha}(t) \hat{\gamma}_{\alpha}^{(1)} \mathbf{p}^{(1)} \\ &= \hat{\Omega}^{(1)} \mathbf{p}^{(1)}, \end{aligned} \quad (20a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{p}^{(2)}}{dt} &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha} H_{\alpha}(t) \hat{\gamma}_{\alpha}^{(2)} \mathbf{p}^{(2)} \\ &= \hat{\Omega}^{(2)} \mathbf{p}^{(2)} \end{aligned} \quad (20b).$$

Les matrices  $\hat{\Omega}^{(1)}$ ,  $\hat{\Omega}^{(2)}$  sont des matrices d'évolution "partielles" antisymétriques (de dimension  $q$  et  $r-q$  respectivement). D'après les équations non couplées (20), les deux vecteurs  $\mathbf{p}^{(1)}$  et  $\mathbf{p}^{(2)}$  évoluent indépendamment l'un de l'autre.

Du caractère antisymétrique de  $\hat{\Omega}^{(1)}$  et  $\hat{\Omega}^{(2)}$ , découle la conservation de la norme de  $\mathbf{p}^{(1)}$  et de celle de  $\mathbf{p}^{(2)}$ , soit

$$(\mathbf{p}^{(1)})^2 = c^{1e}, \quad (21a)$$

$$(\mathbf{p}^{(2)})^2 = c^{2e}. \quad (21b)$$

On a évidemment

$$\mathbf{P}^2 = (\mathbf{p}^{(1)})^2 + (\mathbf{p}^{(2)})^2 = c^{1e}, \quad (22)$$

c'est-à-dire que l'on retrouve la propriété générale (voir II) liée à la constante du mouvement conjoncturelle [Eq. (7b)].

L'appartenance de  $\hat{H}(t)$  à  $su(n)$  conduit donc à prévoir deux constantes du mouvement numériques au lieu de l'unique fournie par  $\mathbf{P}^2$ .

**Remarque.** Comme le montreront certains des exemples traités ci-dessous, lorsque la nature de  $\mathcal{S}_O$  et la forme de  $\hat{H}(t)$  s'y prêtent, on peut étendre évidemment la réduction de  $\hat{\Omega}(t)$  et la "décomposition" correspondante de  $\mathbf{P}(t)$ , en utilisant la chaîne de sous-algèbres de Lie

$$u(1) \subset su(2) \subset su(3) \subset \dots \subset su(m) \subset \dots \subset su(n-1) \subset su(n).$$

Le passage de  $\hat{\Omega}(t)$  à la forme réduite a lieu grâce à une transformation orthogonale indépendante du temps, puisqu'on passe, dans  $\mathcal{E}$ , d'une  $F$ -base fixe à une autre base fixe.

*Exemples*

( $\alpha$ ) Spin  $\frac{1}{2}$  ( $n=2$ ;  $r=3$ ). On utilise alors  $su(2)$ . Considérons une particule de spin  $\frac{1}{2}$  soumise à un champ magnétique constant dirigé suivant l'axe  $x_3$ .

On a les "composantes" de l'hamiltonien  $\hat{H}$ :

$$H_1 = H_2 = 0, \quad H_3 \neq 0,$$

d'où, pour les trois composantes du vecteur de cohérence  $P(t)$

$$P_1^2 + P_2^2 = c^{1e},$$

$$P_3 = c^{1e}.$$

Ce résultat bien connu [6] est une conséquence de la relation entre algèbres de Lie

$$u(1) \subset su(2),$$

avec

$$\hat{H} \sim \hat{\sigma}_3 \in u(1).$$

Supposons maintenant la particule soumise à un champ magnétique constant (dirigé suivant  $x_3$ ) et à un champ magnétique tournant, normal au premier. On a alors

$$H_1(t) \neq 0, \quad H_2(t) \neq 0, \quad H_3 \neq 0,$$

et seulement

$$P_1^2 + P_2^2 + P_3^2 = P^2 = c^{1e}$$

car

$$\hat{H} = H_1(t)\hat{\sigma}_1 + H_2(t)\hat{\sigma}_2 + H_3\hat{\sigma}_3 \in su(2).$$

Si, au champ constant suivant  $x_3$ , on ajoute un champ oscillant suivant  $x_2$ , on a

$$H_1 = 0, \quad H_2(t) \neq 0, \quad H_3 \neq 0,$$

mais cela n'entraîne pas une décomposition de  $P$  en sous-vecteurs, car  $\hat{H}(t)$  appartient à  $su(2)$  comme dans le cas précédent, et non à  $u(1)$  comme dans le premier cas.

( $\beta$ ) Spin 1 ( $n=3$ ;  $r=8$ ). On utilise alors  $su(3)$ . Nous pouvons reprendre les divers dispositifs envisagés pour le spin  $\frac{1}{2}$ , en exploitant la chaîne d'algèbres de Lie

$$u(1) \subset su(2) \subset su(3)$$

de manière différente suivant le cas.

—Champ magnétique constant:

$$\hat{H} = H_3\hat{\Sigma}_3 \in u(1).$$

En écrivant le vecteur de cohérence sous la forme

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{p}^{(1)} \\ \mathbf{p}^{(2)} \\ \mathbf{p}^{(3)} \end{pmatrix}$$

( $\mathbf{p}^{(1)}$  a 1 composante;  $\mathbf{p}^{(2)}$ , 2 composantes; et  $\mathbf{p}^{(3)}$ , 5 composantes), On a séparément:

$$(\mathbf{p}^{(1)})^2 = c^{te},$$

$$(\mathbf{p}^{(2)})^2 = c^{te},$$

$$(\mathbf{p}^{(3)})^2 = c^{te}.$$

—Champ magnétique constant + champ tournant:

$$\hat{H}(t) = H_1(t)\hat{\Sigma}_1 + H_2(t)\hat{\Sigma}_2 + H_3\hat{\Sigma}_3 \in su(2).$$

En posant,

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{p}^{(1)} \\ \mathbf{p}^{(2)} \end{pmatrix}$$

( $\mathbf{p}^{(1)}$  a 3 composantes;  $\mathbf{p}^{(2)}$ , 5 composantes), on a

$$(\mathbf{p}^{(1)})^2 = C^{te}$$

$$(\mathbf{p}^{(2)})^2 = C^{te}.$$

—Champ magnétique constant + champ oscillant suivant  $x_2$ :

$$\hat{H}(t) = H_2(t)\hat{\Sigma}_2 + H_3\hat{\Sigma}_3 \in su(2).$$

On obtient les mêmes résultats que pour le cas ci-dessus.

### 5. Conclusion

Les considérations développées dans cet article montrent l'intérêt d'introduire, dans l'étude d'un système quantique  $\mathcal{S}_Q$  à  $n$  états, le concept de constantes du mouvement conjoncturelles. Ces grandeurs sont d'une existence et d'un usage généraux, quel que soit l'hamiltonien qui régit l'évolution du système, tandis que les CM habituellement considérées (dénommées ici structurelles) sont d'une détermination moins immédiate.

Il est important de remarquer que l'obtention générale et facile des CM conjoncturelles est liée à la procédure d'étude proposée pour les systèmes quantiques à  $n$  états, où les notions fondamentales sont celles de l'espace des états  $\mathcal{H}_n$  [à partir duquel on peut introduire l'algèbre de Lie  $\mathcal{E}, \approx su(n)$ ] et celle de l'état représenté par l'opérateur-densité  $\hat{\rho}(t)$ ; la notion d'hamiltonien n'est introduite qu'en second lieu, avec une forme algébrique variable suivant la nature physique de  $\mathcal{S}_Q$ . L'usage de  $\mathcal{H}_n$  ne fait donc intervenir ni la notion d'opérateur de symétrie—défini comme opérateur laissant invariant l'hamiltonien de  $\mathcal{S}_Q$ , ni la

notion corrélative de  $CM$  structurelle. Dans l'étude "habituelle" au contraire, on part en général d'un hamiltonien  $\hat{H}$  dont la forme analytique est déterminée à partir des hypothèses faites sur la constitution, la structure physique de  $\mathcal{S}_0$ ; cette forme analytique permet alors de trouver les symétries éventuelles de  $\mathcal{S}_0$  et les  $CM$  structurelles correspondantes. On peut dire qu'au modèle "géométrico-physique" de la méthode habituelle, est substitué, par la considération *a priori* de  $su(n)$ , un modèle "algébrico-physique".

Pour l'obtention de diverses  $CM$  conjoncturelles, il convient de souligner l'intérêt d'utiliser soit des  $F$ -bases mobiles dans  $\mathcal{E}_r$ , soit des  $F$ -bases fixes. Dans ce dernier cas, il est souvent utile de choisir des bases adaptées à l'existence de sous-algèbres de Lie pour  $su(n)$ .

### Bibliography

- [1] J. Tillieu et A. Van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* **23**, 1807 (1983).
- [2] J. Tillieu et A. Van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* **23**, 1817 (1983).
- [3] F. T. Hioe et J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 838 (1981).
- [4] J. N. Elgin, *Phys. Lett.* **80A**, 140 (1980).
- [5] Voir, par exemple, A. Lichnerowicz, *Algèbre et analyse linéaires* (Masson et Cie, Paris, 1947), p. 96.
- [6] Voir, par exemple, F. A. Kaempffer, *Concepts in Quantum Mechanics* (Academic, New York, 1965), p. 50.

Received October 6, 1983

Accepted for publication February 9, 1984

### c) EVOLUTION DES ETATS EQUIVALENTS

Nous avons été amenés au chapitre II à examiner le cas des états équivalents de Jauch. rappelons brièvement ce dont il s'agit. Lorsqu'on ne mesure que certaines grandeurs, il est possible que les valeurs moyennes obtenues ne déterminent pas complètement  $\hat{\rho}$ . Tous les états conduisant à ces mêmes moyennes sont considérés comme équivalents au sens de Jauch.

Dans le cas de l'évolution hamiltonienne d'un système, il est alors important de savoir si des états équivalents à un instant donné restent équivalents entre eux au cours du temps. Si ce n'est pas le cas, des mesures à différents instants permettent de distinguer les états et la notion d'états équivalents pour ces mesures perd de son intérêt. Par contre, il existe certains systèmes d'observables pour lesquels les états restent équivalents. Le problème peut alors être étudié de deux façons.

Premièrement, étant donné un ensemble d'observables, quels sont les opérateurs d'évolution qui conservent l'équivalence ?

Deuxièmement, étant donné l'opérateur d'évolution, quels sont les systèmes d'observables pour lesquels les états équivalents le restent ? Il y en a évidemment toujours un, l'identité ; comme il n'est pas utile, nous l'éliminerons en exigeant de plus que les opérateurs soient de trace nulle. Ceci permet de chercher des conditions exprimées dans  $\mathcal{E}_r$ . Les résultats obtenus sont indiqués dans la note suivante.

PHYSIQUE THÉORIQUE. — Sur l'évolution hamiltonienne des états équivalents de Jauch.

Note de Augustin Van Groenendael et Jacques Tillieu, présentée par Raymond Daudel.

Remise le 17 septembre 1984.

On détermine à quelles conditions une relation d'équivalence au sens de Jauch (états équivalents par rapport à un ensemble d'observables) est conservée au cours de l'évolution (décrite par un hamiltonien) d'un système quantique à «  $n$  états ».

*THEORETICAL PHYSICS.* — On Hamiltonian Evolution of Jauch's Equivalent States.

*We establish the conditions under which Jauch's equivalence relation (equivalent states with respect to an observable set) is kept through an "n quantum states" system time evolution described by a Hamiltonian.*

1. L'état d'un système quantique  $S_Q$  peut être décrit par un opérateur-densité  $\hat{\rho}$  ([1], [2], [3]). La détermination complète de cet opérateur nécessite, pour un système à  $n$  états, la mesure des valeurs moyennes de  $n^2 - 1$  observables linéairement indépendantes [4]. Dans la plupart des cas, on doit se contenter des valeurs moyennes d'un plus petit nombre d'opérateurs. Pour traiter de cette situation, Jauch a introduit ([3], [5]) la notion d'états équivalents par rapport à un ensemble  $g$  d'observables. Deux états  $\hat{\rho}_1$  et  $\hat{\rho}_2$  sont dits  $g$ -équivalents si on ne peut les distinguer en mesurant les valeurs moyennes d'opérateurs de  $g$ , c'est-à-dire si l'on a :

$$(1) \quad \text{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{G}) = \text{Tr}(\hat{\rho}_2 \hat{G}), \quad \forall \hat{G} \in g.$$

Cette relation sépare l'ensemble des opérateurs-densités en classes de  $g$ -équivalence. La question peut alors être posée de savoir si des états  $g$ -équivalents à un instant donné le restent au cours du temps.

2. Nous n'étudierons que le cas de dimension finie  $n$ ; cela permet d'utiliser le formalisme développé dans ([4], [6], [7] et [8]). Nous introduisons donc l'espace  $\mathcal{E}$  des opérateurs hermitiques de trace nulle et, dans cet espace, une base  $\{\hat{Q}_J\}$  orthonormée au sens de Fano [9], c'est-à-dire telle que :

$$(2) \quad \text{Tr}(\hat{Q}_J \hat{Q}_K) = \delta_{JK}, \quad J, K = 1, \dots, n^2 - 1.$$

On sait que  $\mathcal{E}$ , muni du commutateur multiplié par  $i$ , est isomorphe à l'algèbre de Lie  $su(n)$ .

On a alors les expressions de l'opérateur-densité  $\hat{\rho}$  et de l'observable  $\hat{G}$  :

$$(3) \quad \hat{\rho} = \frac{1}{n} \left( \hat{I} + \sum_{j=1}^{n^2-1} P_j \hat{Q}_j \right),$$

$$(4) \quad \hat{G} = G_0 \hat{I} + \sum_{j=1}^{n^2-1} G_j \hat{Q}_j.$$

La valeur moyenne de  $\hat{G}$  est alors donnée par :

$$(5) \quad \langle \hat{G} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{G}) = G_0 + \frac{1}{n} \mathbf{G} \cdot \mathbf{P},$$

en considérant les nombres réels  $G$ , et  $P$ , comme les composantes dans un espace euclidien réel  $\bar{\mathcal{E}}$  de deux vecteurs  $G$  et  $P$ . Le vecteur  $P$  est souvent appelé vecteur de cohérence.

En utilisant (1) et (5), on voit facilement qu'une relation de  $g$ -équivalence peut être exprimée ainsi : pour un ensemble donné  $g$  d'observables, des vecteurs  $P$  représentent des états  $g$ -équivalents si et seulement s'ils ont même projection sur chacun des vecteurs  $G$ , pour  $G \in g$ .

L'ensemble des vecteurs  $G$ , pour  $G \in g$ , muni de la combinaison linéaire engendre un sous-espace vectoriel  $\bar{\mathcal{E}}(g)$  de  $\bar{\mathcal{E}}$ . Le résultat précédent peut alors être énoncé : deux opérateurs-densités sont  $g$ -équivalents si et seulement si leurs vecteurs de cohérence ont même projection dans  $\bar{\mathcal{E}}(g)$ , c'est-à-dire si leur différence est dans l'espace orthogonal  $\bar{\mathcal{E}}'(g)$ .

Inversement, si l'on considère un sous-espace vectoriel  $\bar{\mathcal{E}}'$  de  $\bar{\mathcal{E}}$ , il est possible d'introduire une relation d'équivalence entre états en considérant comme équivalents deux états dont les vecteurs de cohérence ont leur différence dans  $\bar{\mathcal{E}}'$ .

Certaines généralisations de la notion de sous-système, décrites par Haake [10], font intervenir des relations de ce type. On peut voir facilement qu'une telle équivalence est une  $g$ -équivalence. Il suffit pour cela de considérer un ensemble de vecteurs qui engendre le sous-espace orthogonal à  $\bar{\mathcal{E}}'$ . Un ensemble  $g$  d'observables en est déduit par la formule (4) et l'espace  $\bar{\mathcal{E}}(g)$  correspondant est le sous-espace de  $\bar{\mathcal{E}}$  orthogonal à  $\bar{\mathcal{E}}'$ .

3. (a) Supposons maintenant le système soumis à une évolution hamiltonienne :

$$(6) \quad \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}].$$

On sait [7] que l'espace des observables  $\mathcal{E}$  est un espace porteur de la représentation adjointe de  $su(n)$ . L'opérateur  $\text{Ad}(\hat{H})$  défini par :

$$\text{Ad}(\hat{H}) \hat{G} = i [\hat{H}, \hat{G}],$$

engendre alors un opérateur d'évolution dans  $\bar{\mathcal{E}}$ ; c'est un opérateur linéaire réel antisymétrique  $\hat{\Omega}$  ([7], [8]) agissant sur le vecteur de cohérence  $P$ .

(b) Pour que les classes de  $g$ -équivalence soient conservées sous l'action de  $\text{Ad}(\hat{H})$ , il faut et il suffit que le sous-espace  $\bar{\mathcal{E}}'(g)$ , orthogonal de  $\bar{\mathcal{E}}(g)$ , soit invariant sous l'action de  $\hat{\Omega}$ . En effet, soit  $P_1(t)$  et  $P_2(t)$  les vecteurs de cohérence, à l'instant  $t$ , de deux états tels que :

$$P_1(t) - P_2(t) \in \bar{\mathcal{E}}'(g).$$

On veut également avoir, à l'instant  $t + dt$ ,

$$P_1(t + dt) - P_2(t + dt) \in \bar{\mathcal{E}}'(g),$$

ou encore, de manière équivalente,

$$\frac{d}{dt} (P_1 - P_2) = \hat{\Omega} (P_1 - P_2) \in \bar{\mathcal{E}}'(g),$$

c'est-à-dire la relation d'invariance :

$$(7) \quad \hat{\Omega} \bar{\mathcal{E}}'(g) \subset \bar{\mathcal{E}}'(g).$$

Puisque l'opérateur  $\hat{\Omega}$  est antisymétrique, il est équivalent de dire qu'il conserve le sous-espace  $\bar{\mathcal{E}}(g)$ .

Lorsque  $\hat{H}$  dépend de  $t$ , les opérateurs  $\text{Ad}(\hat{H}(t))$  à différents instants doivent être considérés comme différents mais ils engendrent une sous-algèbre de Lie de  $su(n)$ , soit  $\mathcal{L}(\hat{H})$ . La relation (7) est valable à n'importe quel instant si  $\bar{\mathcal{E}}'(g)$  ou  $\bar{\mathcal{E}}(g)$  est invariant sous l'effet de  $\mathcal{L}(\hat{H})$ .

4. Deux manières d'utiliser les résultats précédents méritent d'être signalées :

(a) Lorsque l'hamiltonien  $\hat{H}(t)$  est connu, on peut obtenir des ensembles  $g$  d'observables fournissant des classes de  $g$ -équivalence stables au cours du temps; pour cela, on construit la sous-algèbre  $\mathcal{L}(\hat{H})$ ; on en déduit une décomposition de  $\bar{\mathcal{E}}$  en sous-espaces invariants sous l'effet de  $\mathcal{L}(\hat{H})$ , par usage des représentations irréductibles de cette algèbre. Des sous-espaces du type  $\bar{\mathcal{E}}(g)$  ou  $\bar{\mathcal{E}}'(g)$  sont alors obtenus comme sommes directes des espaces irréductibles ci-dessus.

(b) Lorsqu'un ensemble  $g$  d'observables est donné, on peut construire  $\bar{\mathcal{E}}(g)$  et en déduire la forme la plus générale possible d'un hamiltonien conservant les classes de  $g$ -équivalence.

En effet, l'ensemble des opérateurs représentant  $su(n)$  sur  $\bar{\mathcal{E}}$  et conservant  $\bar{\mathcal{E}}(g)$  engendre une sous-algèbre de Lie de  $su(n)$ . On choisit, dans cette sous-algèbre, un ensemble d'opérateurs formant une base.

L'hamiltonien cherché est alors une combinaison linéaire réelle, à coefficients dépendant du temps, des opérateurs de cette base.

#### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] J. VON NEUMANN, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1955.
- [2] J. L. PARK et H. MARGENAU, *Int. J. Theor. Phys.*, 1, 1968, p. 211.
- [3] J. M. JAUCH, *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1968.
- [4] J. TILLIEU et A. VAN GROENENDAEL, *Int. J. Quantum Chem.*, 23, 1983, p. 1807.
- [5] J. M. JAUCH, *Helv. Phys. Acta*, 37, 1964, p. 293.
- [6] F. T. HIOE et J. H. EBERLY, *Phys. Rev. Lett.*, 47, 1981, p. 838.
- [7] J. TILLIEU et A. VAN GROENENDAEL, *Int. J. Quantum Chem.*, 23, 1983, p. 1817.
- [8] J. TILLIEU et A. VAN GROENENDAEL, *Int. J. Quantum Chem.*, 24, 1984, p. 479.
- [9] U. FANO, *Rev. Mod. Phys.*, 29, 1957, p. 74.
- [10] F. HAAKE, *Springer Tracts in Mod. Phys.*, 66, 1973, p. 98.

Laboratoire de Physique théorique,  
Université des Sciences et Techniques de Lille, 59655 Villeneuve-d'Ascq Cedex.

#### IV - ETUDE DES SYSTEMES COMPOSES

Une méthode très générale pour construire un système physique consiste à le former à partir de deux ou plusieurs systèmes plus simples. Les propriétés du système composé sont alors définies à partir de celles des systèmes composants et des propriétés d'interaction entre ces composants. L'espace des opérateurs hermitiques est alors le produit tensoriel des espaces correspondants pour les sous-systèmes. Les relations entre les états ou opérateurs-densités attachés au système composé et à ses composants sont obtenues dans l'article V, de façon détaillée.

Considérons deux systèmes repérés par les indices A et B, et le système composé repéré par l'indice A,B. Les espaces de cohérence  $\bar{\mathcal{E}}_r$  sont  $\bar{\mathcal{E}}_{r_A}$ ,  $\bar{\mathcal{E}}_{r_B}$ ,  $\bar{\mathcal{E}}_{r_{A,B}}$  de dimension respective  $r_A = n_A^2 - 1$ ,  $r_B = n_B^2 - 1$ ,  $r_{AB} = (n_A n_B)^2 - 1$ . Ces espaces sont liés par la relation

$$\bar{\mathcal{E}}_{r_{AB}} = \bar{\mathcal{E}}_{r_A} \oplus \bar{\mathcal{E}}_{r_B} \oplus (\bar{\mathcal{E}}_{r_A} \otimes \bar{\mathcal{E}}_{r_B}) \quad (1)$$

établie dans l'article V. Lorsque les espaces des observables  $\mathcal{E}_{r_A}$  et  $\mathcal{E}_{r_B}$  sont munis de F-bases  $\{\hat{Q}_J^A\}$  et  $\{\hat{Q}_J^B\}$ , il est possible de munir  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$  de la F-base

$$\hat{Q}_J^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}, \quad \frac{\hat{I}_A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_K^B, \quad \hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B \quad (2)$$

Les relations écrites dans le tableau récapitulatif, à la fin de l'appendice A, sont valables dans toute F-base; elles sont donc également

valables pour les tenseurs  $\Delta^{A,B}$  et  $\Gamma^{A,B}$  construits sur  $\bar{\mathcal{E}}_{r_{A,B}}$  à partir des opérateurs (2).

Choisir comme F-base dans  $\mathcal{E}_{r_A}$  et  $\mathcal{E}_{r_B}$  des bases standard (B-1), fait de  $\Delta^A, \Gamma^A$  et  $\Delta^B, \Gamma^B$  respectivement des tenseurs sur  $\bar{\mathcal{E}}_{r_A}$  et  $\bar{\mathcal{E}}_{r_B}$ , invariants par toutes les transformations  $\hat{O}[\hat{U}]$  introduites au chapitre III. Ces tenseurs définissent sur  $\bar{\mathcal{E}}_{r_A}$  et  $\bar{\mathcal{E}}_{r_B}$  des structures invariantes par la représentation  $\hat{O}[\hat{U}]$  du groupe unitaire SU(n). La base (2) n'est cependant pas une base standard sur  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$ , comme nous le constaterons plus loin. Pour définir les tenseurs  $\Delta^{A,B}$  et  $\Gamma^{A,B}$  à partir de  $\Delta^A, \Gamma^A, \Delta^B, \Gamma^B$ , nous utilisons les tenseurs complexes  $\Omega_{I,J,K}$  donnés par la formule (A-6). Les composantes de ce tenseur sont obtenues en calculant les produits deux à deux des opérateurs (2) ci-dessus. Nous noterons respectivement  $\hat{I}^A, \hat{I}^B, \hat{I}^{AB}$ , les opérateurs identité,  $n_A, n_B, n_{AB}$  les dimensions des espaces  $\bar{\mathcal{E}}_{r_A}, \bar{\mathcal{E}}_{r_B}, \bar{\mathcal{E}}_{r_{AB}}$ . Nous obtenons alors les formules (3).

$$(\hat{Q}_J^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}) (\hat{Q}_K^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}) = \frac{\hat{I}^{AB}}{n_{AB}} \delta_{JK} + \sum_M \frac{\Omega_{JKM}^A}{\sqrt{n_B}} \hat{Q}_M^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}$$

$$(\hat{Q}_J^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}) (\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_L^B) = \frac{1}{\sqrt{n_{AB}}} \hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_L^B$$

$$(\hat{Q}_J^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}) (\hat{Q}_K^A \otimes \hat{Q}_L^B) = \frac{\delta_{JK}}{\sqrt{n_{AB}}} (\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_L^B) + \sum_M \frac{\Omega_{JKM}^A}{\sqrt{n_B}} (\hat{Q}_M^A \otimes \hat{Q}_L^B)$$

$$(\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_L^B) (\hat{Q}_J^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}) = \frac{1}{\sqrt{n_{AB}}} \hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_L^B$$

$$(\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_L^B) (\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_K^B) = \frac{\hat{I}^{AB}}{n_{AB}} \delta_{LK} + \sum_S \frac{\Omega_{LKS}^B}{\sqrt{n_A}} (\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_S^B)$$

$$(\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_B}} \otimes \hat{Q}_L^B) (\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B) = \frac{\delta_{JK}}{\sqrt{n_{AB}}} (\hat{Q}_J^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}) + \sum_S \frac{\Omega_{LKS}^B}{\sqrt{n_A}} (\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_S^B)$$

$$(\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_L^B) (\hat{Q}_K^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}) = \frac{\delta_{JK}}{\sqrt{n_{AB}}} (\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_L^B) + \sum_S \frac{\Omega_{JKS}^A}{\sqrt{n_B}} (\hat{Q}_S^A \otimes \hat{Q}_L^B)$$

$$(\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_L^B) (\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_M^B) = \frac{\delta_{LM}}{\sqrt{n_{AB}}} (\hat{Q}_J^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}}) + \sum_S \frac{\Omega_{LMS}^B}{\sqrt{n_A}} (\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_S^B)$$

$$(\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_L^B) (\hat{Q}_K^A \otimes \hat{Q}_M^B) = \frac{\delta_{JK} \delta_{LM}}{n_{AB}} \hat{I}^{AB} + \delta_{LM} \sum_R \frac{\Omega_{JKR}^A}{\sqrt{n_B}} (\hat{Q}_R^A \otimes \frac{\hat{I}_B}{\sqrt{n_B}})$$

$$+ \delta_{JK} \sum_S \frac{\Omega_{LMS}^B}{\sqrt{n_A}} (\frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_S^B) + \sum_{R,S} \Omega_{JKR}^A \Omega_{LMS}^B (\hat{Q}_R^A \otimes \hat{Q}_S^B)$$



On constate, par exemple sur les lignes 2 et 4, la présence du facteur  $\frac{1}{\sqrt{n_{AB}}}$ , qui est un certain coefficient  $\Omega_{IJK}$  sur l'espace  $\tilde{\mathcal{E}}_{r_{AB}}$ . En se reportant à la table de l'appendice B, on voit qu'un tel coefficient, évalué dans une base standard, ne peut avoir cette valeur. Cette constatation justifie l'affirmation qu'une F-base de  $\tilde{\mathcal{E}}_{r_{AB}}$  construite par produit tensoriel à partir de F-bases, standard ou non, de  $\mathcal{E}_{r_A}$  et  $\mathcal{E}_{r_B}$  n'est pas standard. Elle ne peut jamais vérifier les formules données dans la table de l'appendice B.

Cette nouvelle F-base est par contre très bien adaptée au calcul des "traces réduites", c'est-à-dire à l'opération qui, à l'état du système global fait correspondre les états des sous-systèmes. Considérons le passage du système AB au sous-système A. On obtient l'opérateur densité réduit de A par la définition

$$\hat{\rho}_A = \text{tr}_B \hat{\rho}_{AB} \quad (4)$$

Les opérateurs de la F-base deviennent alors

$$\tilde{Q}_J^A \otimes \frac{\tilde{I}^B}{\sqrt{n_B}} \rightarrow \sqrt{n_B} \tilde{Q}_J^A$$

$$\frac{\tilde{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \tilde{Q}_K^B \rightarrow 0$$

$$\tilde{Q}_J^A \otimes \tilde{Q}_K^B \rightarrow 0$$

Si le vecteur de cohérence du système AB a les composantes  $p_{JL}^A, p_{LJ}^B, p_{JL}^{AB}$ , le vecteur de cohérence du sous-système A possède alors les composantes  $\sqrt{n_B} p_{JL}^A$ . Le vecteur de cohérence du système global AB est donc formé, à un facteur  $\sqrt{n_B}$  ou  $\sqrt{n_A}$  près, de la somme directe des vecteurs de cohérence des sous-systèmes A et B et d'un tenseur de composantes  $p_{JL}^{AB}$ . Ce dernier tenseur sert à décrire la corrélation entre les sous-systèmes A et B. Fano a introduit, dans le cas  $n_A = n_B = 2$ , un

tenseur de corrélation  $\vec{C}$  [FANO,83]. Dans le cas plus général étudié ici, ce tenseur peut être défini par ses composantes

$$C_{JL} = \frac{1}{n_{AB}} \left( p_{JL}^{AB} - \frac{p_J^A p_L^B}{\sqrt{n_A n_B}} \right) \quad (5)$$

Ce tenseur est nul lorsqu'il n'y a pas de corrélation entre les deux sous-systèmes.

Un système décomposable en deux sous-systèmes fournit plusieurs exemples d'états équivalents au sens de Jauch [JAU,68]. Nous avons déjà défini de tels états au chapitre précédent. Si l'on ne mesure que des propriétés du système A, deux états sont équivalents s'ils ont même vecteur  $\vec{p}^A$ .

Un autre exemple est également envisagé dans l'article V qui suit : l'ensemble des observables est formé des observables de A et des observables de B, il ne contient aucune observable agissant simultanément sur A et B. Une classe d'états équivalents est caractérisée par les vecteurs  $\vec{p}^A$  et  $\vec{p}^B$ , elle ne dépend pas de  $\vec{C}$ . Dans la note placée à la fin du chapitre précédent, nous avons établi les conditions pour lesquelles des états équivalents le restent au cours du temps. Si nous appliquons ces résultats aux états équivalents pour le système A, nous voyons qu'il faut et il suffit que l'espace  $\mathcal{E}_{r_A}$ , en tant que sous-espace de  $\mathcal{E}_{r_{AB}}$ , soit conservé au cours du temps. Il est possible d'expliciter cette condition en posant pour tout  $\hat{Q}_J^A$  :

$$[\hat{H}, \hat{Q}_J^A] \in \text{su}(n_A).$$

Or  $\hat{H}$  est une combinaison linéaire des opérateurs (2) de la F-base de  $\mathcal{E}_{r_{AB}}$ .

Pour alléger l'écriture, nous identifions systématiquement  $\hat{M} \otimes \hat{I}$  avec  $\hat{M}$  et  $\hat{I} \otimes \hat{N}$  avec  $\hat{N}$ . Les commutateurs des éléments de la F-base avec les  $\hat{Q}_J^A$  sont tels que :

$$[\hat{Q}_K^A, \hat{Q}_J^A] \in su(n_A)$$

$$[\hat{Q}_L^B, \hat{Q}_J^A] = 0$$

$$[\hat{Q}_K^A \otimes \hat{Q}_L^B, \hat{Q}_J^A] = -i \sum_M C_{MKJ}^A \hat{Q}_M^A \otimes \hat{Q}_L^B$$

Les éléments  $\hat{Q}_K^A \otimes \hat{Q}_L^B$  ne peuvent donc intervenir que dans une somme

$$\sum_K f_K \hat{Q}_K^A \otimes \hat{Q}_L^B, \quad f_K \in \mathbb{R}$$

telle que

$$\sum_{K=1}^{r_A} f_K C_{MKJ}^A = 0 \quad M, J = 1, \dots, r_S$$

Cela signifierait que la matrice

$$\sum_{K=1}^{r_A} f_K \hat{Q}_K^A$$

commuterait avec tous les  $\hat{Q}_J^A$ , seule la matrice nulle a cette propriété par conséquent, les  $f$  sont tous nuls. L'équation d'évolution du système AB donne pour le sous-système A, une équation d'évolution indépendante de l'état de B si et seulement si le hamiltonien est de la forme

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_J h_J^A \hat{Q}_J^A + \sum_i h_L^B \hat{Q}_L^B \\ &= \hat{H}^A + \hat{H}^B \end{aligned} \quad (6)$$

ce qui revient à dire qu'il n'y a pas d'interaction entre les deux sous-systèmes A et B. L'expression (6) est symétrique pour A et B ; une telle évolution conserve donc non seulement  $\bar{\mathcal{E}}_{r_A}$  mais aussi  $\bar{\mathcal{E}}_{r_B}$  et par conséquent  $\bar{\mathcal{E}}_{r_A} \otimes \bar{\mathcal{E}}_{r_B}$  qui est l'espace associé aux variables sans corrélation utilisées dans le deuxième exemple de relation d'équivalence.

Dans l'article V, nous étudions également les simplifications apportées aux équations d'évolution du système composé dans le cas où le hamiltonien appartient à une sous-algèbre de  $su(n_{AB})$  dont les restrictions aux systèmes A et B sont de la forme  $su(m_A)$  et  $su(m_B)$ .

## Usage de l'Algèbre de Lie $su(n)$ dans l'Étude des Systèmes Quantiques à $n$ États. V. Application aux Systèmes Composés

AUGUSTIN VAN GROENENDAEL ET JACQUES TILLIEU

Laboratoire de Physique Théorique, Université de Lille I, 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France

### Resume

L'usage de l'algèbre de Lie  $su(n)$ , proposé dans les articles précédents, est adapté à l'étude d'un système formé de deux sous-systèmes, respectivement à  $n_A$  et  $n_B$  états. On montre comment diverses notions (opérateurs-densités réduits, problèmes de corrélation, équations d'évolution globales et réduites) peuvent être précisées grâce au formalisme introduit.

We adapt the use of the Lie algebra  $su(n)$  we proposed in former papers to a system made up of two subsystems (respectively,  $n_A$  and  $n_B$  states). We show how reduced density operators, correlation problems, and overall and reduced evolution equations, may be made precise with this formalism.

### I. Introduction

Il est fréquent d'étudier, en mécanique quantique, des systèmes composés constitués par l'union (avec ou sans interaction) de sous-systèmes composants (voir, par exemple, [1-3]).

Nous envisagerons, dans cet article, deux systèmes quantiques  $S_Q^A, S_Q^B$  (supposés, pour simplifier, non identiques) dont les espaces des états  $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$  sont de dimension finie, respectivement  $n_A, n_B$ . Ces deux systèmes peuvent être combinés en un système  $S_Q^{A,B}$  dont l'espace des états de dimension  $n_A n_B$ , est constitué par le produit tensoriel

$$\mathcal{H}_{A,B} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (1)$$

L'étude d'un tel système a fait l'objet d'une revue par Fano [4], dans le cas particulier  $n_A = n_B = 2$ .

Nous nous proposons de montrer, de manière générale, que l'usage de l'algèbre de Lie  $su(n)$  que nous avons introduit dans trois articles précédents, notés I [5], II [6] et III [7] peut être étendu à l'étude des systèmes composés  $S_Q^{A,B}$  et permet d'exprimer de manière systématique un certain nombre de notions et de résultats indiqués par Fano [1, 4] et de les étendre en les reliant à des résultats bien connus de la théorie des algèbres de Lie.

### II. Algèbre de Lie $su(n_A n_B)$ pour le Système Composé

(a) En reprenant les définitions et notations de l'article I, on peut associer à  $\mathcal{H}_A$  une algèbre de Lie réelle  $\mathcal{E}_A$ , qui est l'espace des observables de  $S_Q^A$ , isomorphe à  $su$

$(n_A)$ , de dimension  $r_A = n_A^2 - 1$ , et y introduire une  $F$ -base orthonormée (ou base de Fano [1])  $\{\hat{Q}_J^A\}$  ( $J = 1 \rightarrow r_A$ ).

Un opérateur-densité décrivant un état de  $S_Q^A$  peut alors être écrit:

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{n_A} \left( \hat{I}^A + \sum_{J=1}^{r_A} P_J^A \hat{Q}_J^A \right), \quad P_J^A \in R, \quad (2)$$

$$= \frac{1}{n_A} (\hat{I}^A + \mathbf{P}^A \hat{Q}^A), \quad (2')$$

où le vecteur de cohérence  $\mathbf{P}^A$  est un vecteur appartenant à un espace réel euclidien  $\mathcal{E}_{r_A}$ , de dimension  $r_A$ , que nous appelons désormais espace de cohérence de  $S_Q^A$ .

On a [Formule I-(15)]:

$$(\mathbf{P}^A)^2 \leq n_A(n_A - 1). \quad (3)$$

(L'égalité est réalisée pour un état pur.)

(b) De même, on peut associer à  $S_Q^B$ , une algèbre de Lie réelle  $\mathcal{E}_{r_B}$ , isomorphe à su  $(n_B)$ , de dimension  $r_B = n_B^2 - 1$  et y introduire une  $F$ -base  $\{\hat{Q}_K^B\}$  ( $K = 1 \rightarrow r_B$ ), ainsi qu'un vecteur  $\mathbf{P}^B$  défini par une relation du type (2') et appartenant à l'espace de cohérence  $\mathcal{E}_{r_B}$  de  $S_Q^B$ . On a également:

$$(\mathbf{P}^B)^2 \leq n_B(n_B - 1). \quad (3')$$

(c) Au système composé  $S_Q^{A,B}$ , on peut associer l'algèbre de Lie  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$ , isomorphe à su  $(n_A n_B)$  de dimension  $r_{A,B} = n_A^2 n_B^2 - 1$  (qui est différente de  $r_A r_B$ ).

Une  $F$ -base peut alors y être introduite grâce aux produits tensoriels suivants, précisant ceux indiqués par Fano [1, 4]:

$$\hat{Q}_J^A \otimes \hat{I}^B / \sqrt{n_B}, \quad J = 1 \rightarrow r_A, \quad (4a)$$

$$\hat{I}^A / \sqrt{n_A} \otimes \hat{Q}_K^B, \quad K = 1 \rightarrow r_B, \quad (4b)$$

$$\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B, \quad J = 1 \rightarrow r_A, \quad K = 1 \rightarrow r_B, \quad (4c)$$

soit au total:

$$r_A + r_B + r_A r_B = n_A^2 n_B^2 - 1 = r_{A,B},$$

opérateurs qui sont orthonormés au sens de Fano [le facteur  $1/\sqrt{n_B}$  ou  $1/\sqrt{n_A}$  est introduit dans (4-1) ou (4-2) pour assurer la normalisation]. En effet, on a bien, d'après les propriétés du produit tensoriel, et des  $F$ -bases de  $\mathcal{E}_{r_A}$  et  $\mathcal{E}_{r_B}$ , par exemple:

$$\text{Tr}(\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B) = \text{Tr}_A \hat{Q}_J^A \cdot \text{Tr}_B \hat{Q}_K^B = 0,$$

$$\text{Tr} \left[ \left( \hat{Q}_J^A \otimes \frac{\hat{I}^B}{\sqrt{n_B}} \right) \left( \hat{Q}_{J'}^A \otimes \frac{\hat{I}^B}{\sqrt{n_B}} \right) \right] = \frac{1}{n_B} \text{Tr}_A(\hat{Q}_J^A \hat{Q}_{J'}^A) \cdot \text{Tr}_B \hat{I}^B = \delta_{JJ'},$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}[(\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B)(\hat{Q}_{J'}^A \otimes \hat{Q}_{K'}^B)] &= \text{Tr}[(\hat{Q}_J^A \hat{Q}_{J'}^A) \otimes (\hat{Q}_K^B \hat{Q}_{K'}^B)] \\ &= \text{Tr}_A(\hat{Q}_J^A \hat{Q}_{J'}^A) \text{Tr}_B(\hat{Q}_K^B \hat{Q}_{K'}^B) = \delta_{JJ'} \cdot \delta_{KK'}. \end{aligned}$$

Puisque l'on possède  $r_{A,B}$  opérateurs orthonormés, ceux-ci forment bien une base de  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$ .

D'autre part, le commutateur (multiplié par  $i$ ) de deux éléments de  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$  est un opérateur hermitique de trace nulle, c'est-à-dire un élément de l'espace des observables de  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$  qui possède bien la structure d'algèbre de Lie réelle. L'appendice A rassemble les formules utiles au calcul des commutateurs des éléments de  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$ .

(d) Par analogie avec (2), tout opérateur-densité décrivant un état du système composé  $S_Q^{A,B}$  peut être écrit sous la forme:

$$\hat{\rho}_{A,B} = \frac{1}{n_A n_B} \left( \hat{I}^A \otimes \hat{I}^B + \sum_{j=1}^{r_A} P_j^A \hat{Q}_j^A \otimes \frac{\hat{I}^B}{\sqrt{n_B}} + \sum_{k=1}^{r_B} P_k^B \frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_k^B + \sum_{j=1}^{r_A} \sum_{k=1}^{r_B} P_{jk}^{AB} \hat{Q}_j^A \otimes \hat{Q}_k^B \right), \quad (5)$$

avec respectivement [voir formule I-(11)].

$$P_j^A = n_A n_B \operatorname{Tr} \left[ \hat{\rho}_{A,B} \left( \hat{Q}_j^A \otimes \frac{\hat{I}^B}{\sqrt{n_B}} \right) \right], \quad (6a)$$

$$P_k^B = n_A n_B \operatorname{Tr} \left[ \hat{\rho}_{A,B} \left( \frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{Q}_k^B \right) \right], \quad (6b)$$

$$P_{jk}^{AB} = n_A n_B \operatorname{Tr} [\hat{\rho}_{A,B} (\hat{Q}_j^A \otimes \hat{Q}_k^B)]. \quad (6c)$$

*Remarques*

(a) On peut voir facilement [formule (A-1)] que l'ensemble  $\mathcal{E}_{r_A} \otimes \hat{I}^B$ , isomorphe à  $\operatorname{su}(n_A)$ , est une sous-algèbre de Lie de  $\operatorname{su}(n_A n_B)$ , ce que l'on peut écrire:

$$\mathcal{E}_{r_A} \otimes \hat{I}^B \in \mathcal{E}_{r_{A,B}}. \quad (7a)$$

De même, on a:

$$\hat{I}^A \otimes \mathcal{E}_{r_B} \in \mathcal{E}_{r_{A,B}}. \quad (7b)$$

tandis que l'ensemble  $\mathcal{E}_{r_A} \otimes \mathcal{E}_{r_B}$  est seulement un sous-espace vectoriel de  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$ , soit

$$\mathcal{E}_{r_A} \otimes \mathcal{E}_{r_B} \subset \mathcal{E}_{r_{A,B}}. \quad (8)$$

On peut écrire

$$\mathcal{E}_{r_{A,B}} = (\mathcal{E}_{r_A} \otimes \hat{I}^B) \oplus (\hat{I}^A \otimes \mathcal{E}_{r_B}) \oplus (\mathcal{E}_{r_A} \otimes \mathcal{E}_{r_B}). \quad (9)$$

(b) Il est facile d'obtenir une sous-algèbre de Cartan  $\mathcal{E}_{n_A n_B - 1}^c$  de  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$  (sous-algèbre de Lie abélienne maximale, de dimension  $n_A n_B - 1$ ) lorsqu'on connaît une sous-algèbre de Cartan  $\mathcal{E}_{n_A - 1}^c$  de  $\mathcal{E}_{r_A}$  et une sous-algèbre de Cartan  $\mathcal{E}_{n_B - 1}^c$  de  $\mathcal{E}_{r_B}$ .

On peut écrire:

$$\mathcal{E}_{n_A n_B - 1}^c = (\mathcal{E}_{n_A - 1}^c \otimes \hat{I}^B) \oplus (\hat{I}^A \otimes \mathcal{E}_{n_B - 1}^c) \oplus (\mathcal{E}_{n_A - 1}^c \otimes \mathcal{E}_{n_B - 1}^c). \quad (10)$$

Rappelons [5] qu'il ne peut exister, pour le système composé  $S_Q^{A,B}$ , que  $n_A n_B - 1$  observables (de trace nulle) commutables deux à deux et linéairement indépendantes.

(c) D'après la définition (5) et corrélativement à la formule (10), l'espace de cohérence global  $\overline{\mathcal{E}}_{r_{A,B}}$  peut être décomposé en une somme directe de sous-espaces, soit:

$$\overline{\mathcal{E}}_{r_{A,B}} = \overline{\mathcal{E}}_{r_A} \oplus \overline{\mathcal{E}}_{r_B} \oplus (\overline{\mathcal{E}}_{r_A} \otimes \overline{\mathcal{E}}_{r_B}). \quad (11)$$

Le vecteur de cohérence global est alors écrit sous la forme

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^A \oplus \mathbf{P}^B \oplus \mathbf{P}^{AB}, \quad (12)$$

avec les vecteurs "partiels"

$$\mathbf{P}^A \in \mathcal{E}_{r_A}, \quad (12'a)$$

$$\mathbf{P}^B \in \mathcal{E}_{r_B}, \quad (12'b)$$

$$\mathbf{P}^{AB} \in \mathcal{E}_{r_A} \otimes \mathcal{E}_{r_B}. \quad (12'c)$$

(Par définition,  $\mathbf{P}^{AB}$  a dans la  $F$ -base (4) les composantes  $P_{JK}^{AB}$ , numérotées par deux indices, l'un  $J$  relatif à  $S_Q^A$ , l'autre  $K$  relatif à  $S_Q^B$ .)

D'après les propriétés générales des opérateurs-densités et des vecteurs de cohérence, on a la relation

$$\mathbf{P}^2 = (\mathbf{P}^A)^2 + (\mathbf{P}^B)^2 + (\mathbf{P}^{AB})^2 \leq n_A n_B (n_A n_B - 1). \quad (13)$$

L'égalité correspond à un état pur de  $S_Q^{A,B}$ .

(d) Il est intéressant de noter, dans un but pratique, que l'existence de la  $F$ -base (4) montre la possibilité de construire une  $F$ -base d'opérateurs (ou une représentation matricielle fondamentale de dimension  $n_A n_B$ ) de  $su(n_A n_B)$ , à partir d'une  $F$ -base (d'opérateurs ou de matrices de dimension  $n_A$ ) de  $su(n_A)$  et d'une  $F$ -base (d'opérateurs ou de matrices de dimension  $n_B$ ) de  $su(n_B)$ . Cette possibilité permet de simplifier les calculs nécessaires à l'obtention d'une  $F$ -base de  $su(n_A n_B)$  en fournissant, par exemple pour  $su(6)$ , une  $F$ -base matricielle de dimension 6, à partir d'une  $F$ -base matricielle de dimension 2 pour  $su(2)$  et d'une  $F$ -base matricielle de dimension 3 pour  $su(3)$ , au lieu de construire, par le procédé indiqué dans *l*, une  $F$ -base de  $su(6)$  à partir d'un système orthonormé complet de  $\mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$  [8, 9].

### III. Opérateurs — Densités Réduits pour les Sous-Systèmes

(a) On sait qu'il est possible de définir et décrire l'état d'un sous-système de  $S_Q^{A,B}$  à l'aide d'un opérateur-densité réduit [2, 3]. Par exemple, pour  $S_Q^A$  considéré comme sous-système de  $S_Q^{A,B}$ , on peut décrire l'état par un opérateur-densité  $\hat{\rho}_A^{\text{red}}$  défini par

$$\text{Tr}[\hat{\rho}_{A,B}(\hat{G}^A \otimes \hat{I}^B)] = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^{\text{red}} \hat{G}^A), \quad \forall \hat{G}^A \in \mathcal{E}_{r_A}, \quad (14)$$

ou, de manière équivalente mais plus simple

$$\hat{\rho}_A^{\text{red}} = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{A,B}. \quad (15a)$$

Pour le sous-système  $S_Q^B$ , on a de même:

$$\hat{\rho}_B^{\text{red}} = \text{Tr}_A \hat{\rho}_{A,B}. \quad (15b)$$

(b) A partir de la définition (5), on trouve facilement

$$\hat{\rho}_A^{\text{red}} = \frac{1}{n_A} \hat{I}^A + \frac{1}{n_A \sqrt{n_B}} \sum_{j=1}^{r_A} P_j^A \hat{Q}_j^A, \quad (16a)$$

$$\hat{\rho}_B^{\text{red}} = \frac{1}{n_B} \hat{I}^B + \frac{1}{\sqrt{n_A n_B}} \sum_{k=1}^{r_B} P_k^B \hat{Q}_k^B, \quad (16b)$$

formes identiques à (2) si l'on pose

$$\mathbf{P}'^A = \frac{1}{\sqrt{n_B}} \mathbf{P}^A \in \overline{\mathcal{E}}_{r_A}, \quad (17a)$$

$$\mathbf{P}'^B = \frac{1}{\sqrt{n_B}} \mathbf{P}^B \in \overline{\mathcal{E}}_{r_B}. \quad (17b)$$

*Remarque*

Il est important de noter que le vecteur de cohérence relatif au sous-système  $S_0^A$  (respect  $S_0^B$ ) est le vecteur  $\mathbf{P}'^A$  (respect.  $\mathbf{P}'^B$ ) et qu'il diffère par un facteur numérique  $1/\sqrt{n_B}$  (respect.  $1/\sqrt{n_A}$ ) du vecteur "partiel"  $\mathbf{P}^A$  (respect.  $\mathbf{P}^B$ ) du vecteur de cohérence global  $\mathbf{P}$  [formule (12)].

**IV. Etats Globaux Equivalents — Problèmes de Corrélation**

(A) D'après les définitions données pour les opérateurs-densités réduits à partir d'un opérateur-densité  $\hat{\rho}_{A,B}$  décrivant l'état du système composé  $S_0^{A,B}$  — état que nous appelons global pour bien le distinguer des états des sous-systèmes — on voit facilement, à partir de la forme générale (5) de  $\hat{\rho}_{A,B}$ , que tous les états globaux qui possèdent le même vecteur "partiel"  $\mathbf{P}^A$  (de composantes  $P_J^A, J = 1 \rightarrow r_A$ ) fournissent la même valeur moyenne pour une observable *quelconque*  $\hat{G}^A$  de  $S_0^A$  (ou une observable  $\hat{G}^A \otimes \hat{I}^B$  de  $S_0^{A,B}$ ).

En utilisant la notion d'états (globaux) équivalents, introduite par Jauch [2; voir également I], on peut donc dire que tous ces opérateurs-densités, que nous noterons  $\hat{\rho}_{A,B}(\mathbf{P}^A)$ , sont  $\{\mathbf{G}^A\}$ -équivalents; nous les appellerons des *états  $S_0^A$ -équivalents*. De même, des opérateurs-densités  $\hat{\rho}_{A,B}(\mathbf{P}^B)$  ( $\mathbf{P}^B$  fixé dans  $\overline{\mathcal{E}}_{r_B}$ ) décrivent des *états  $S_0^B$ -équivalents*.

On peut aussi considérer des états  $S_0^A$ - $S_0^B$ -équivalents décrits par des opérateurs densités  $\hat{\rho}_{A,B}(\mathbf{P}^A, \mathbf{P}^B)$  ( $\mathbf{P}^A$  et  $\mathbf{P}^B$  fixés), pour lesquels les valeurs moyennes des observables  $\hat{G}^A \otimes \hat{I}^B$  et  $\hat{I}^A \otimes \hat{G}^B$  sont les mêmes. Ces opérateurs-densités diffèrent entre eux par le vecteur partiel  $\mathbf{P}^{AB}$ .

Les états  $S_0^A$ -équivalents (respect.  $S_0^B$ -équivalents) sont ceux qui fournissent un même état pour le sous-système  $S_0^A$  (respect.  $S_0^B$ ). Les états  $S_0^A$ - $S_0^B$  équivalents fournissent simultanément un même état pour  $S_0^A$  et un même état pour  $S_0^B$ .

Une classe de  $S_0^A$ - $S_0^B$ -équivalence est caractérisée par une paire de vecteurs partiels  $\mathbf{P}^A, \mathbf{P}^B$  et l'on voit facilement que l'opérateur-densité

$$\hat{\rho}_{A,B}^{\text{non-corr}} = \hat{\rho}_A^{\text{red}}(\mathbf{P}^A) \otimes \hat{\rho}_B^{\text{red}}(\mathbf{P}^B), \quad (18)$$

appartient à une telle classe et peut en être choisi comme élément représentatif (voir I).

(B) (a) La *corrélation* entre les deux sous-systèmes  $S_0^A$  et  $S_0^B$  constituant le système  $S_0^{A,B}$  est étudiée à l'aide d'observables de la forme  $\hat{G}^A \otimes \hat{G}^B$ , puisque toute observable de  $S_0^{A,B}$  peut être exprimée (dans le cas  $n_A$  et  $n_B$  finis) comme une combinaison linéaire réelle de tels produits tensoriels, par exemple des éléments de la  $F$ -base (4).

On a ainsi, de manière générale, pour un état global caractérisé par le vecteur de cohérence  $\mathbf{P}(\mathbf{P}^A, \mathbf{P}^B, \mathbf{P}^{AB})$ ,

$$\langle \hat{G}^A \otimes \hat{G}^B; \mathbf{P}^A, \mathbf{P}^B, \mathbf{P}^{AB} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}_{A,B}(\hat{G}^A \otimes \hat{G}^B)]. \quad (19)$$

On voit facilement que, pour l'état (18) (correspondant à  $\mathbf{P}^{AB} = \mathbf{P}'^A \otimes \mathbf{P}'^B$ ) on a:

$$\text{Tr}[\hat{\rho}_{A,B}^{\text{non-corr}}(\hat{G}^A \otimes \hat{G}^B)] = \langle \hat{G}^A \otimes \hat{G}^B; \mathbf{P}^A, \mathbf{P}^B, \mathbf{P}'^A \otimes \mathbf{P}'^B \rangle = \langle \hat{G}^A; \mathbf{P}'^A \rangle \langle \hat{G}^B; \mathbf{P}'^B \rangle. \quad (20)$$

(20) exprime l'absence de corrélation entre les propriétés de  $S_Q^A$  et celles de  $S_Q^B$  et l'opérateur-densité (18) décrit donc un état non-corrélé du système composé  $S_Q^{A,B}$ .

(b) Il est courant d'exprimer la corrélation à l'aide des quantités

$$\langle \hat{G}^A \otimes \hat{G}^B; \mathbf{P}^A, \mathbf{P}^B, \mathbf{P}^{AB} \rangle - \langle \hat{G}^A; \mathbf{P}'^A \rangle \langle \hat{G}^B; \mathbf{P}'^B \rangle. \quad (21)$$

Puisque toute observable de  $S_Q^{A,B}$  peut être exprimée à l'aide des observables de la  $F$ -base (4) et que seuls les opérateurs (4-3) ont un intérêt pour l'étude de la corrélation, il suffit de considérer les expressions (23) de la forme

$$C_{JK}^{AB} = \langle \hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B; \mathbf{P}^A, \mathbf{P}^B, \mathbf{P}^{AB} \rangle - \langle \hat{Q}_J^A; \mathbf{P}'^A \rangle \langle \hat{Q}_K^B; \mathbf{P}'^B \rangle, \quad (22)$$

qui sont les éléments d'une matrice rectangulaire (tenseur) à  $r_A$  lignes et  $r_B$  colonnes.

Celle-ci constitue une généralisation de la *matrice de corrélation* introduite par Fano [4], pour le cas particulier  $n_A = n_B = 2$ . En tenant compte des définitions (19), (20) et d'une remarque précédente, on voit facilement que l'on a

$$C_{JK}^{AB} = \frac{1}{n_A n_B} (P_{JK}^{AB} - P_J'^A P_K'^B). \quad (22')$$

On obtient ainsi une expression simple des coefficients de corrélation à partir des vecteurs de cohérence.

(c) Des résultats ci-dessus, on déduit facilement que l'opérateur densité  $\hat{\rho}_{A,B}$  peut être écrit sous la forme:

$$\hat{\rho}_{A,B} = \hat{\rho}_A^{\text{red}} \otimes \hat{\rho}_B^{\text{red}} + \frac{1}{n_A n_B} \sum_J \sum_K (P_{JK}^{AB} - P_J'^A P_K'^B) \hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B, \quad (23)$$

$$= \hat{\rho}_A^{\text{red}} \otimes \hat{\rho}_B^{\text{red}} + \sum_J \sum_K C_{JK}^{AB} \hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B, \quad (23')$$

formule qui généralise celle obtenue par Fano pour  $n_A = n_B = 2$ .

D'après (23'), on voit que si  $\hat{\rho}_{A,B}$  a la forme (18) d'un produit tensoriel, on a  $C_{JK}^{AB} = 0$ , ( $\forall J, K$ ) en vertu de l'indépendance linéaire des  $\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B$  et l'état correspondant est un état non-corrélé; réciproquement, si la matrice de corrélation est nulle,  $\hat{\rho}_{A,B}$  peut être écrit sous la forme d'un produit tensoriel.

(d) On obtient facilement le résultat suivant

$$\text{Tr} \hat{\rho}_{A,B}^2 = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^{\text{red}})^2 \cdot \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^{\text{red}})^2 + \sum_J \sum_K (C_{JK}^{AB})^2 + \frac{2}{n_A n_B} \sum_J \sum_K C_{JK}^{AB} P_J'^A P_K'^B \leq 1, \quad (24)$$

que l'on peut encore écrire uniquement à l'aide des vecteurs de cohérence

$$\text{Tr} \hat{\rho}_{A,B}^2 = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^{\text{red}})^2 \cdot \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^{\text{red}})^2 + \frac{1}{n_A^2 n_B^2} [(P^{AB})^2 - (P'^A)^2 (P'^B)^2] \leq 1. \quad (24')$$

(e) Lorsque les états réduits  $\hat{\rho}_A^{\text{red}}$  et  $\hat{\rho}_B^{\text{red}}$  sont tous deux des états purs, on sait [par

ex. 2] que  $S_Q^{A,B}$  est nécessairement dans l'état pur:

$$\hat{\rho}_{A,B} = \hat{\rho}_A^{\text{red}} \otimes \hat{\rho}_B^{\text{red}}. \quad (25)$$

On a alors:

$$\text{Tr } \hat{\rho}_{A,B}^2 = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^{\text{red}})^2 = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^{\text{red}})^2 = 1$$

et la relation (24') devient:

$$(\mathbf{P}^{AB})^2 = (\mathbf{P}'^A)^2 (\mathbf{P}'^B)^2,$$

en accord avec (25) qui conduit à

$$\mathbf{P}^{AB} = \mathbf{P}'^A \otimes \mathbf{P}'^B.$$

### V. Evolution du Système Composé $S_Q^{A,B}$

(a) L'évolution de l'opérateur-densité  $\hat{\rho}_{A,B}$ -évolution que l'on supposera hamiltonienne-peut être étudiée à partir de l'équation différentielle bien connue

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{A,B}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}_{A,B}], \quad (26)$$

où  $\hat{H}$  est l'hamiltonien du système composé  $S_Q^{A,B}$ . Dans la  $F$ -base,  $\hat{H}$  peut être écrit sous une forme analogue à (5), à l'aide de ses composantes  $H'_J{}^A$ ,  $H'_K{}^B$  et  $H'_{JK}{}^{AB}$  dont les expressions sont rassemblées dans l'appendice B.

(b) On peut aussi, de manière générale (voir II), étudier l'évolution de l'état de  $S_Q^{A,B}$  par celle du vecteur de cohérence  $\mathbf{P}$  dans l'espace de cohérence  $\mathbb{E}_{r_{A,B}}$ , grâce à l'équation vectorielle [voir formule II-(35')].

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \hat{\Omega}\mathbf{P}, \quad (27)$$

où  $\hat{\Omega}$  est une matrice réelle antisymétrique, de dimension  $r_{A,B}$ .

En corrélation avec la forme (12) du vecteur de cohérence global, on peut écrire la matrice globale d'évolution  $\hat{\Omega}$  sous la forme supermatricielle:

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \hat{\Omega}_A^A & \hat{\Omega}_B^A & \hat{\Omega}_{AB}^A \\ \hat{\Omega}_A^B & \hat{\Omega}_B^B & \hat{\Omega}_{AB}^B \\ \hat{\Omega}_A^{AB} & \hat{\Omega}_B^{AB} & \hat{\Omega}_{AB}^{AB} \end{pmatrix}, \quad (28)$$

$\hat{\Omega}_A^A$ ,  $\hat{\Omega}_B^B$ ,  $\hat{\Omega}_{AB}^{AB}$  sont des matrices réelles antisymétriques, respectivement de dimension  $n_A^2 - 1$ ,  $n_B^2 - 1$ , et  $(n_A^2 - 1)(n_B^2 - 1)$ .

Les éléments de  $\text{su}(n_A)$  et ceux de  $\text{su}(n_B)$  agissent sur les espaces différents  $\mathbb{E}_{r_A}$  et  $\mathbb{E}_{r_B}$  et commutent donc entre eux. On en déduit:

$$\hat{\Omega}_A^B = 0; \quad \hat{\Omega}_B^A = 0.$$

$\hat{\Omega}_{AB}^A$  est une matrice réelle rectangulaire à  $n_A^2 - 1$  lignes et  $(n_B^2 - 1)$  colonnes et l'on a:

$$\hat{\Omega}_A^{AB} = -\hat{\Omega}_{AB}^A.$$

Enfin,  $\Omega_{AB}^B$  est une matrice réelle rectangulaire à  $n_B^2 - 1$  lignes et  $(n_A^2 - 1)(n_B^2 - 1)$  colonnes et l'on a :

$$\hat{\Omega}_{AB}^{AB} = -\widetilde{\hat{\Omega}}_{AB}^B.$$

Compte tenu de ces indications,  $\hat{\Omega}$  a la forme supermatricielle

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \hat{\Omega}_A^A & 0 & \hat{\Omega}_{AB}^A \\ 0 & \hat{\Omega}_B^B & \hat{\Omega}_{AB}^B \\ -\widetilde{\hat{\Omega}}_{AB}^A & -\widetilde{\hat{\Omega}}_{AB}^B & \hat{\Omega}_{AB}^{AB} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

(c) L'équation vectorielle (27) peut alors être séparée en 3 équations vectorielles partielles

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}^A}{dt} &= \hat{\Omega}_A^A \mathbf{P}^A + \hat{\Omega}_{AB}^A \mathbf{P}^{AB}, \\ \frac{d\mathbf{P}^B}{dt} &= \hat{\Omega}_B^B \mathbf{P}^B + \hat{\Omega}_{AB}^B \mathbf{P}^{AB}, \\ \frac{d\mathbf{P}^{AB}}{dt} &= -\widetilde{\hat{\Omega}}_{AB}^A \mathbf{P}^A - \widetilde{\hat{\Omega}}_{AB}^B \mathbf{P}^B + \hat{\Omega}_{AB}^{AB} \mathbf{P}^{AB}. \end{aligned} \quad (30)$$

Les deux premières montrent que les évolutions de  $\mathbf{P}_A$  et  $\mathbf{P}^B$  (c'est-à-dire des états des deux sous-systèmes) ne sont couplées que par l'intermédiaire de  $\mathbf{P}^{AB}$ .

(d) Nous savons [voir article II] que l'opérateur  $\hat{\Omega}$  peut être considéré comme l'hamiltonien agissant sur l'espace de cohérence  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$ . Ses éléments matriciels peuvent être obtenus, par un calcul sans difficulté de principe, en identifiant, dans les deux membres de (26), les coefficients relatifs à un même élément de la  $F$ -base (4). Des simplifications peuvent être apportées à ce calcul, d'une part en utilisant les résultats généraux de II, d'autre part en tenant compte de la décomposition (11) de l'espace  $\mathcal{E}_{r_{A,B}}$ .

Les résultats de ce calcul sont réunis dans l'appendice C.

### VI. Usage de Sous-Algèbres de Lie Dans les Problèmes D'Evolution

(a) Les équations (27) ou (30) constituent un système différentiel de  $r_{A,B}$  équations du 1er ordre, dont l'expression détaillée est très lourde et la résolution souvent peu aisée. Certaines simplifications peuvent y être apportées en utilisant, comme il a été indiqué dans l'article III, l'existence de sous-algèbres de Lie.

En effet, les résultats de III montrent que, si l'hamiltonien  $\hat{H}$  appartient à  $\mathfrak{su}(m)$ , sous-algèbre de Lie de  $\mathfrak{su}(n)$ , l'espace de cohérence  $\mathcal{E}_r$  peut être écrit sous la forme [voir relation III-(20)].

$$\mathcal{E}_r = \mathcal{E}_q \oplus \mathcal{E}_q^c, \quad (31)$$

où  $\mathcal{E}_q$  ( $q = m^2 - 1$ ) est l'espace de cohérence relatif à  $\mathfrak{su}(m)$  et  $\mathcal{E}_q^c$  son espace complémentaire.

Si l'on écrit corrélativement:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}' \oplus \mathbf{P}'', \quad (32)$$

avec

$$\mathbf{P}' \in \mathcal{E}_q, \quad \mathbf{P}'' \in \mathcal{E}_q^c,$$

les vecteurs  $\mathbf{P}'$  et  $\mathbf{P}''$  évoluent indépendamment l'un de l'autre, c'est-à-dire que les sous-espaces  $\mathcal{E}_q$  et  $\mathcal{E}_q^c$  sont invariants sous l'effet de  $\hat{H}$ .

(b) Pour appliquer les considérations ci-dessus à l'évolution d'un système composé, nous envisageons, pour fixer les idées, un exemple d'intérêt physique fréquent (interaction de spins soumis à des champs magnétiques), en supposant que, dans la formule (A-7), l'hamiltonien appartient à une sous-algèbre de Lie  $\mathfrak{su}(m_A)$  de  $\mathfrak{su}(n_A)$  ( $m_A < n_A$ ),  $\hat{H}_B$  à une sous-algèbre de Lie  $\mathfrak{su}(m_B)$  de  $\mathfrak{su}(n_B)$  ( $m_B < n_B$ ) et l'hamiltonien d'interaction  $\hat{H}^{AB}$  au sous-espace  $\mathfrak{su}(m_A) \otimes \mathfrak{su}(m_B)$  de  $\mathfrak{su}(n_A) \otimes \mathfrak{su}(n_B)$ .

Les  $F$ -bases respectives de  $\mathcal{E}_{r_A}$  et  $\mathcal{E}_{r_B}$  sont adaptées à l'usage de ces sous-algèbres, de manière que l'on ait: dans  $\mathcal{E}_{r_A}$ , la  $F$ -base

$$\{\hat{Q}^A\} = \{\hat{Q}_\alpha^A, \hat{Q}_L^A\},$$

avec

$$\alpha = 1 \rightarrow m_A^2 - 1; \quad L = m_A^2 \rightarrow n_A^2 - 1. \quad (33)$$

On a corrélativement

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{r_A} &= \mathcal{E}_{q_A} \oplus \mathcal{E}_{q_A}^c \quad (q_A = m_A^2 - 1), \\ \mathbf{P}^A &= \mathbf{P}^{A'} \oplus \mathbf{P}^{A''}, \end{aligned} \quad (34)$$

avec

$$\mathbf{P}^{A'} \in \mathcal{E}_{q_A}; \quad \mathbf{P}^{A''} \in \mathcal{E}_{q_A}^c. \quad (35)$$

Dans  $\mathcal{E}_{r_B}$ , la  $F$ -base

$$\{\hat{Q}_K^B\} = \{\hat{Q}_\beta^B, \hat{Q}_M^B\}$$

avec

$$\beta = 1 \rightarrow m_B^2 - 1; \quad M = m_B^2 \rightarrow n_B^2 - 1. \quad (36)$$

[On a corrélativement

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{r_B} &= \mathcal{E}_{q_B} \oplus \mathcal{E}_{q_B}^c \quad (q_B = m_B^2 - 1), \\ \mathbf{P}^B &= \mathbf{P}^{B'} \oplus \mathbf{P}^{B''}, \end{aligned} \quad (37)$$

avec

$$\mathbf{P}^{B'} \in \mathcal{E}_{q_B}; \quad \mathbf{P}^{B''} \in \mathcal{E}_{q_B}^c. \quad (38)$$

Les hypothèses introduites ci-dessus pour l'hamiltonien sont alors exprimées par les conditions relatives à ses composantes:

$$H_\alpha^A \neq 0; \quad H_L^A = 0, \quad (39a)$$

$$H_\beta^B \neq 0; \quad H_M^B = 0, \quad (39b)$$

$$H_{\alpha\beta}^{AB} \neq 0; \quad H_{\alpha M}^{AB} = H_{L\beta}^{AB} = H_{LM}^{AB} = 0. \quad (39c)$$

(c) Il suit des conditions (39a), (39b) et des formules (B-1) et (B-2) que les matrices  $\hat{\Omega}_A^A$  et  $\hat{\Omega}_B^B$  sont de la forme plus simple:

$$\hat{\Omega}_A^A = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha=1}^{m_A^2-1} H_\alpha^A \hat{\Gamma}_\alpha^A, \quad (40a)$$

$$\hat{\Omega}_B^B = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\beta=1}^{m_B^2-1} H_\beta^B \hat{\Gamma}_\beta^B. \quad (40b)$$

D'autre part, en utilisant le fait que  $\text{su}(m_A)$  et  $\text{su}(m_B)$  sont des sous-algèbres de Lie, on a [Voir III-(17)]

$$\hat{\Gamma}_\alpha^A = \hat{\gamma}_\alpha^{A'} \oplus \hat{\gamma}_\alpha^{A''}, \quad (41a)$$

où  $\hat{\gamma}_\alpha^{A'}$  est une matrice carrée antisymétrique agissant sur  $\mathcal{E}_{q_A}$ ,  $\hat{\gamma}_\alpha^{A''}$  une matrice carrée antisymétrique agissant sur  $\mathcal{E}_{q_A}^c$ .

De même:

$$\hat{\Gamma}_\beta^B = \hat{\gamma}_\beta^{B'} \oplus \hat{\gamma}_\beta^{B''}, \quad (41b)$$

où  $\hat{\gamma}_\beta^{B'}$  agit sur  $\mathcal{E}_{q_B}$ ,  $\hat{\gamma}_\beta^{B''}$  sur  $\mathcal{E}_{q_B}^c$ .

Les matrices (40) peuvent alors être écrites:

$$\hat{\Omega}_A^A = \hat{\Omega}_{A'}^{A'} \oplus \hat{\Omega}_{A''}^{A''}, \quad (42a)$$

$$\hat{\Omega}_B^B = \hat{\Omega}_{B'}^{B'} \oplus \hat{\Omega}_{B''}^{B''}, \quad (42b)$$

où, par exemple,  $\hat{\Omega}_{A'}^{A'}$ , agissant sur le sous-espace  $\mathcal{E}_{q_A}$  est fournie par une relation analogue à (40a), soit

$$\hat{\Omega}_{A'}^{A'} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha=1}^{m_A^2-1} H_\alpha^A \hat{\gamma}_\alpha^{A'}. \quad (43)$$

(d) En vertu de (34), (36) et (11), on peut écrire la décomposition

$$\mathcal{E}_{r_A} \otimes \mathcal{E}_{r_B} = (\mathcal{E}_{q_A} \otimes \mathcal{E}_{q_B}) \oplus (\mathcal{E}_{q_A} \otimes \mathcal{E}_{q_B}^c) \oplus (\mathcal{E}_{q_A}^c \otimes \mathcal{E}_{q_B}) \oplus (\mathcal{E}_{q_A}^c \otimes \mathcal{E}_{q_B}^c), \quad (44)$$

et corrélativement

$$\mathbf{P}^{AB} = \mathbf{P}^{A'B'} \oplus \mathbf{P}^{A'B''} \oplus \mathbf{P}^{A''B'} \oplus \mathbf{P}^{A''B''}. \quad (45)$$

(L'indice ' est lié à l'espace de cohérence associé à la sous-algèbre, l'indice '' à son sous-espace complémentaire.)

Il est important de remarquer que, d'après les hypothèses (39c), l'hamiltonien d'interaction  $\hat{H}^{AB}$  "appartient" à  $\mathcal{E}_{q_A} \otimes \mathcal{E}_{q_B}$ . Il s'en suit que les 4 sous-espaces figurant dans (44) sont invariants sous l'effet de l'hamiltonien.

(e) Les formules générales (C-3), combinées avec les conditions particulières (39) permettent d'écrire la matrice  $\hat{\Omega}_{AB}^A$  sous la forme supermatricielle

$$\hat{\Omega}_{AB}^A = \begin{pmatrix} \hat{\Omega}_{A'B'}^{A'} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{\Omega}_{A'B'}^{A'} & 0 \end{pmatrix}. \quad (46)$$

La sous matrice  $\hat{\Omega}_{A'B'}^{A'}$  a les éléments matriciels

$$(\hat{\Omega}_{A'B'}^{A'})_{\alpha, \alpha'\beta} = -\frac{1}{\hbar \sqrt{n_B}} \sum_{\alpha'} (\hat{\gamma}_{\alpha'}^{A'})_{\alpha\alpha'} H_{\alpha'\beta}^{AB}, \quad (47a)$$

et la sous-matrice  $\hat{\Omega}_{A'B'}$

$$(\Omega_{A'B'}^{\alpha'})_{L,L'\beta} = -\frac{1}{\hbar\sqrt{n_B}} \sum_{\alpha'} (\hat{\gamma}_{\alpha'}^{\alpha'})_{LL'} H_{\alpha'\beta}^{AB}. \quad (47b)$$

Ces formes sont analogues à (C-3) mais n'y figurent que les matrices  $\hat{\gamma}_{\alpha}^{\alpha'}$  ou les matrices  $\hat{\gamma}_{\alpha}^{\alpha}$ .

On a des relations semblables pour la matrice  $\hat{\Omega}_{AB}^B$ .

(f) En utilisant encore le fait que  $\text{su}(m_A)$  et  $\text{su}(m_B)$  sont des sous-algèbres de Lie, on trouve facilement que l'on a pour les matrices (C-7) [comparer à (41a) et (41b)]

$$\hat{\Delta}_{\alpha}^A = \hat{\Delta}_{\alpha}^{A'} \oplus \hat{\Delta}_{\alpha}^{A''}, \quad (48a)$$

$$\hat{\Delta}_{\beta}^B = \hat{\Delta}_{\beta}^{B'} \oplus \hat{\Delta}_{\beta}^{B''}. \quad (48b)$$

Compte tenu de ces résultats et de la remarque faite en (d), la matrice carrée  $\hat{\Omega}_{AB}^{AB}$  peut être écrite sous la forme suivante, liée évidemment à (44) et (45).

$$\hat{\Omega}_{AB}^{AB} = \hat{\Omega}_{A'B'}^{A'B'} \oplus \hat{\Omega}_{A''B''}^{A''B''} \oplus \hat{\Omega}_{A'B''}^{A'B''} \oplus \hat{\Omega}_{A''B'}^{A''B'}. \quad (49)$$

Les sous-matrices figurant dans (49) ont des formes analogues à (C-8). Par exemple,  $\hat{\Omega}_{A'B''}^{A'B''}$  est de dimension  $(m_A^2 - 1)(n_B^2 - m_B^2)$  et l'on a:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_{A'B''}^{A'B''} = & -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha=1}^{m_A^2-1} (\hat{\gamma}_{\alpha}^{A'} \otimes \hat{I}^{B''}) H_{\alpha}^{A'} - \frac{1}{\hbar} \sum_{\beta=1}^{m_B^2-1} (\hat{I}^{A'} \otimes \hat{\gamma}_{\beta}^{B''}) H_{\beta}^{B''} \\ & - \frac{1}{2\hbar} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (\hat{\gamma}_{\alpha}^{A'} \otimes \hat{\Delta}_{\beta}^{B''} + \hat{\Delta}_{\alpha}^{A'} \otimes \hat{\gamma}_{\beta}^{B''}) H_{\alpha\beta}^{AB}. \end{aligned} \quad (50)$$

(g) Compte-tenu de tous les résultats précédents, on peut écrire les équations d'évolution partielles suivantes, en les séparant en 4 sous-ensembles non couplés.

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}^{A'}}{dt} &= \hat{\Omega}_{A'}^{A'} \mathbf{P}^{A'} + \hat{\Omega}_{A'B'}^{A'} \mathbf{P}^{A'B'}, \\ \frac{d\mathbf{P}^{B'}}{dt} &= \hat{\Omega}_{B'}^{B'} \mathbf{P}^{B'} + \hat{\Omega}_{A'B'}^{B'} \mathbf{P}^{A'B'}, \end{aligned} \quad (51a)$$

$$\frac{d\mathbf{P}^{A'B'}}{dt} = -\hat{\Omega}_{A'B'}^{A'} \mathbf{P}^{A'} - \hat{\Omega}_{A'B'}^{B'} \mathbf{P}^{B'} + \hat{\Omega}_{A'B'}^{A'B'} \mathbf{P}^{A'B'};$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}^{A''}}{dt} &= \hat{\Omega}_{A''}^{A''} \mathbf{P}^{A''} + \hat{\Omega}_{A''B''}^{A''} \mathbf{P}^{A''B''}, \\ \frac{d\mathbf{P}^{A''B''}}{dt} &= -\hat{\Omega}_{A''B''}^{A''} \mathbf{P}^{A''} + \hat{\Omega}_{A''B''}^{A''B''} \mathbf{P}^{A''B''}; \end{aligned} \quad (51b)$$

$$\frac{d\mathbf{P}^{B''}}{dt} = \hat{\Omega}_{B''}^{B''} \mathbf{P}^{B''} + \hat{\Omega}_{A''B''}^{B''} \mathbf{P}^{A''B''}, \quad (51c)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}^{A''B''}}{dt} &= -\hat{\Omega}_{A''B''}^{B''} \mathbf{P}^{B''} + \hat{\Omega}_{A''B''}^{A''B''} \mathbf{P}^{A''B''}, \\ \frac{d\mathbf{P}^{A''B''}}{dt} &= \hat{\Omega}_{A''B''}^{A''B''} \mathbf{P}^{A''B''}. \end{aligned} \quad (51d)$$

Ces équations montrent que l'on peut regrouper les vecteurs partiels qui composent le vecteur total de cohérence  $P$  d'une manière différente de celle utilisée jusqu'à maintenant et écrire

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}' \oplus \mathbf{P}''_{(A)} \oplus \mathbf{P}''_{(B)} \oplus \mathbf{P}^{A'B'}, \quad (52)$$

avec

$$\mathbf{P}' = \mathbf{P}^A \oplus \mathbf{P}^B \oplus \mathbf{P}^{A'B'} \in \overline{\mathcal{C}}_{q_A} \oplus \overline{\mathcal{C}}_{q_B} \oplus (\overline{\mathcal{C}}_{q_A} \otimes \overline{\mathcal{C}}_{q_B}) \quad (52'a)$$

[ce vecteur a  $m_A^2 m_B^2 - 1$  composantes].

$$\mathbf{P}''_{(A)} = \mathbf{P}^A \oplus \mathbf{P}^{A'B'} \in \overline{\mathcal{C}}_{q_A}^c \oplus (\overline{\mathcal{C}}_{q_A}^c \otimes \overline{\mathcal{C}}_{q_B}) \quad (52'b)$$

[ce vecteur a  $(n_A^2 - m_A^2)m_B^2$  composantes].

$$\mathbf{P}''_{(B)} = \mathbf{P}^B \oplus \mathbf{P}^{A'B'} \in \overline{\mathcal{C}}_{q_B}^c \oplus (\overline{\mathcal{C}}_{q_A} \otimes \overline{\mathcal{C}}_{q_B}^c) \quad (52'c)$$

[ce vecteur a  $m_A^2(n_B^2 - m_B^2)$  composantes].

Rappelons que  $\mathbf{P}^{A'B'}$  a  $(n_A^2 - m_A^2)(n_B^2 - m_B^2)$  composantes.

Les équations (51) peuvent alors être remplacées par les 4 équations vectorielles:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}'}{dt} &= \hat{\Omega}' \mathbf{P}', \\ \frac{d\mathbf{P}''_{(A)}}{dt} &= \hat{\Omega}''_{(A)} \mathbf{P}''_{(A)}, \\ \frac{d\mathbf{P}''_{(B)}}{dt} &= \hat{\Omega}''_{(B)} \mathbf{P}''_{(B)}, \\ \frac{d\mathbf{P}^{A'B'}}{dt} &= \hat{\Omega}^{A'B'} \mathbf{P}^{A'B'}. \end{aligned} \quad (53)$$

La forme des diverses matrices partielles figurant dans (53) est indiquée dans la partie II de l'appendice C.

D'après (53), chacun des sous-vecteurs de  $\mathbf{P}$  est soumis à une évolution hamiltonienne (non couplée à celle des autres) qui est exprimée, dans le sous-espace de cohérence correspondant, par le caractère antisymétrique d'une sous-matrice de  $\hat{\Omega}$ . D'après les propriétés générales d'une telle évolution (voir articles II et III), on a les 4 constantes du mouvement conjoncturelles suivantes (relatives au système global  $S_Q^{A,B}$ ):

$$\mathbf{P}'^2 = (\mathbf{P}^A)^2 + (\mathbf{P}^B)^2 + (\mathbf{P}^{A'B'})^2 = \sum_{\alpha} (P_{\alpha}^A)^2 + \sum_{\beta} (P_{\beta}^B)^2 + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (P_{\alpha\beta}^{AB})^2, \quad (54a)$$

$$(\mathbf{P}''_{(A)})^2 = (\mathbf{P}^A)^2 + (\mathbf{P}^{A'B'})^2 = \sum_L (P_L^A)^2 + \sum_L \sum_{\beta} (P_{L\beta}^{AB})^2, \quad (54b)$$

$$(\mathbf{P}''_{(B)})^2 = (\mathbf{P}^B)^2 + (\mathbf{P}^{A'B'})^2 = \sum_M (P_M^B)^2 + \sum_{\alpha} \sum_M (P_{\alpha M}^{AB})^2, \quad (54c)$$

$$(\mathbf{P}^{A'B'})^2 = \sum_L \sum_M (P_{LM}^{AB})^2. \quad (54d)$$

L'usage des sous-algèbres de Lie  $\text{su}(m_A)$  et  $\text{su}(m_B)$  entraîne donc l'existence de 4 constantes du mouvement, au lieu d'une seule, celle fournie par  $P^2$ , dans un cas quelconque (voir III).

Dans certaines études, on peut ne s'intéresser qu'au vecteur partiel  $P$  et à son évolution qui a lieu dans un espace dont la dimension  $m_A^2 m_B^2 - 1$  peut être notablement inférieure à  $n_A^2 n_B^2 - 1$ .

*Remarque*

Pour le système composé  $S_Q^{A,B}$ , si l'on considère l'ensemble  $\Gamma'$  formé par les observables:

$$\begin{aligned} \hat{Q}_\alpha^A \otimes I^B, \\ \hat{I}^A \otimes Q_\beta^B, \\ \hat{Q}_\alpha^A \otimes Q_\beta^B, \end{aligned}$$

tous les opérateurs-densités  $\hat{\rho}_{A,B}(P')$  (voir paragraphe IV ci-dessous), possédant le même vecteur partiel  $P'$  (et différant entre eux par les vecteurs  $P'_{(A)}$  ou  $P'_{(B)}$  ou  $P'_{A'B'}$  sont des états équivalents au sens de Jauch) et cette  $\Gamma'$ -équivalence est conservée au cours de l'évolution du système composé, puisque  $P'$  évolue indépendamment des autres vecteurs partiels.

On voit ainsi que la notion de  $\Gamma$ -équivalence introduite par Jauch, au moins implicitement, comme une notion instantanée et pouvant donc dépendre de l'instant considéré, peut, dans certains cas, recevoir un sens indépendant du temps et être considérée alors comme une propriété "constante du mouvement" (de nature structurelle, puisque liée à la nature de l'hamiltonien du système qui entraîne l'usage possible de sous-algèbres de Lie).

*Exemple.* Envisageons un spin  $S_A = \frac{1}{2}$  et un spin  $S_B = 1$  soumis à un champ magnétique et à une interaction isotrope. On a donc:

$$\begin{aligned} n_A = 2, \quad r_A = 3 \quad \text{avec usage de su}(2) \approx \mathcal{E}_3 \\ n_B = 3, \quad r_B = 8 \quad \text{avec usage de su}(3) \approx \mathcal{E}_8 \\ r_{A,B} = n_A^2 n_B^2 - 1 = 35. \end{aligned}$$

On sait que les trois opérateurs de spin  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  (qu'on peut supposer normés) forment une base orthogonale de  $\text{su}(2)$  qui est une sous-algèbre de Lie de  $\text{su}(3)$ . On peut donc choisir des  $F$ -bases dans  $\mathcal{E}_3$  et  $\mathcal{E}_8$  telles que:

$$\begin{aligned} \{\hat{Q}^A\} &= \{\hat{Q}_1^A = \hat{S}_x^A, \hat{Q}_2^A = \hat{S}_y^A, \hat{Q}_3^A = \hat{S}_z^A\}, \\ \{\hat{Q}^B\} &= \{\hat{Q}_1^B = \hat{S}_x^B, \hat{Q}_2^B = \hat{S}_y^B, \hat{Q}_3^B = \hat{S}_z^B, \hat{Q}_M^B\} \quad (M = 4 \rightarrow 8). \end{aligned}$$

L'hypothèse d'interaction isotrope entre les deux spins est exprimée par la forme:

$$\hat{H}^{AB} = S^{AB}(\hat{Q}_1^A \otimes \hat{Q}_1^B + \hat{Q}_2^A \otimes \hat{Q}_2^B + \hat{Q}_3^A \otimes \hat{Q}_3^B),$$

où  $S^{AB}$  est une constante de couplage spin-spin.

Dans ces conditions, les seules composantes non nulles de l'hamiltonien sont:

$$\begin{aligned} H_1^A, \quad H_2^A, \quad H_3^A \\ H_1^B, \quad H_2^B, \quad H_3^B \end{aligned}$$

$$H_{11}^{AB}, \quad H_{22}^{AB}, \quad H_{33}^{AB}$$

On peut évidemment utiliser une sous-algèbre "commune" à  $S_A$  et  $S_B$ , soit su (2). On a alors  $m_B = m_A = n_A = 2$  et les divers vecteurs partiels de (52) ont alors les dimensions:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}', \quad q_{A,B} &= m_A^2 m_B^2 - 1 = 15, \\ \mathbf{P}_{(A)}'' &= 0 \quad (\text{dimension } 0), \\ \mathbf{P}_{(B)}'' &= m_A^2 (n_B^2 - m_B^2) = 20, \\ \mathbf{P}_{A'B'}^{A''B''} &= 0 \quad (\text{dimension } 0). \end{aligned}$$

(Dans cet exemple, on a  $\hat{\Delta}_\alpha = 0$ ,  $\hat{\Delta}_\beta^B = 0$ , d'où découle la valeur nulle de deux des vecteurs partiels.)

Si l'on envisage le même problème pour  $S_A = 1$ ,  $S_B = 2$ , on a:

$$\begin{aligned} n_A &= 3, \quad r_A = 8, \quad \text{avec usage de su (3)} \approx \mathcal{E}_8, \\ n_B &= 5, \quad r_B = 24, \quad \text{avec usage de su (5)} \approx \mathcal{E}_{24}, \\ r_{A,B} &= 224. \end{aligned}$$

On a encore la sous-algèbre commune su (2), donc  $m_A = m_B = 2$ . Les vecteurs partiels sont:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}', \quad &\text{de dimension } m_A^2 m_B^2 - 1 = 15, \\ \mathbf{P}_{(A)}'', \quad &\text{de dimension } (n_A^2 - m_A^2) m_B^2 = 20, \\ \mathbf{P}_{(B)}'', \quad &\text{de dimension } m_A^2 (n_B^2 - m_B^2) = 84, \\ \mathbf{P}_{A'B'}^{A''B''}, \quad &\text{de dimension } (n_A^2 - m_A^2) (n_B^2 - m_B^2) = 105. \end{aligned}$$

### VII. Evolution d'un Sous-Système

Revenant au cas général, nous envisageons rapidement l'évolution d'un sous-système,  $S_Q^A$  par exemple, du système composé  $S_Q^{A,B}$ . Nous avons vu que l'état de  $S_Q^A$  peut être décrit à l'aide du vecteur de cohérence  $\mathbf{P}^A = (1/\sqrt{n_B})\mathbf{P}^A$  où  $\mathbf{P}^A$  est un vecteur partiel du vecteur de cohérence total  $\mathbf{P}$ .

L'évolution de l'état de  $S_Q^A$  peut donc être décrite par celle de  $\mathbf{P}^A$  dans l'espace  $\mathcal{E}_{r_A}$ , c'est-à-dire à l'aide de la 1ère équation partielle (30) (équation que l'on peut aussi appeler "équation réduite", sous-entendu à  $S_Q^A$ ), que nous pouvons écrire:

$$\frac{d\mathbf{P}^A}{dt} = \hat{\Omega}_A^A \mathbf{P}^A + \hat{\Omega}_{AB}^A \mathbf{P}^{AB}, \quad (55)$$

ou, pour ses composantes

$$\begin{aligned} \frac{dP_J^A}{dt} &= \sum_{J'=1}^{n_A^2-1} (\hat{\Omega}_A^A)_{JJ'} P_{J'}^A + \sum_{J'}^{n_A^2-1} \sum_{K=1}^{n_B^2-1} (\hat{\Omega}_{AB}^A)_{J,J'K} P_{J'K}^{AB} \\ &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{J'J} C_{J'J}^A H_{J'}^A P_J^A - \frac{1}{\hbar} \sum_{J'J} \sum_K C_{J'J}^A H_{J'K}^{AB} P_{JK}^{AB}. \end{aligned} \quad (56)$$

Cette équation ne décrit plus, en général, une évolution hamiltonienne, à cause d'un terme "extérieur" à  $S_0^A$ , celui qui fait intervenir la matrice rectangulaire — non antisymétrique —  $\hat{\Omega}_{AB}^A$ .

Il s'en suit que le module de  $P^A$  n'est pas une constante du mouvement (comme dans le cas d'un système isolé). On peut le vérifier facilement à partir de (56'); en effet, on a:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d(P^A)^2}{dt} &= P^A \frac{dP^A}{dt} = \sum_J P_J^A \frac{dP_J^A}{dt} = \sum_{J'} \sum_K (\hat{\Omega}_{AB}^A)_{J',JK} P_J^A P_{JK}^{AB} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{J'} \sum_K [(\hat{\Omega}_{AB}^A)_{J',JK} P_J^A P_{JK}^{AB} + (\hat{\Omega}_{AB}^A)_{J',JK} P_J^A P_{JK}^{AB}], \end{aligned}$$

ou encore, d'après la propriété (B-3'),

$$\frac{d(P^A)^2}{dt} = \sum_{J'} \sum_K (\hat{\Omega}_{AB}^A)_{J',JK} (P_J^A P_{JK}^{AB} - P_J^A P_{JK}^{AB}). \quad (57)$$

*Remarques*

(a) Si l'on a [absence de corrélation — voir formules (18) et (25)]

$$P_{JK}^{AB} = P_J^A P_K^B$$

(57) devient alors:

$$\frac{d(P^A)^2}{dt} = 0,$$

et l'on a bien la constante du mouvement  $(P^A)^2$ .

(b) Dans (56) ou (56'), la somme sur  $K$  découle de la réduction à  $S_0^A$ , de  $\hat{\rho}_{A,B}$  et de son équation d'évolution, c'est-à-dire d'un calcul de trace sur  $\mathcal{H}_B$ . Compte tenu de la difficulté de connaître  $P^{AB}$  et son évolution pour pouvoir étudier celle de  $P^A$ , il est bien connu [par ex. 2, 4, 10] qu'il est souvent intéressant de découpler l'équation (56) des équations d'évolution des autres vecteurs partiels, en remplaçant le 2ème terme du second membre de (56) par un terme approché. Un tel procédé, faisant le plus souvent appel à des considérations d'irréversibilité et d'interactions aléatoires, conduit alors à une équation pilote (en anglais, master equation).

**Appendice A. Formulaire pour le Produit Tensoriel**

$$[\hat{Q}_J^A \otimes \hat{I}_B, \hat{Q}_J^A \otimes \hat{I}_B] = [\hat{Q}_J^A, \hat{Q}_J^A] \otimes \hat{I}_B, \quad (A.1)$$

$$[\hat{I}_A \otimes \hat{Q}_K^B, \hat{I}_A \otimes \hat{Q}_K^B] = \hat{I}_A \otimes [\hat{Q}_K^B, \hat{Q}_K^B], \quad (A.2)$$

$$[\hat{Q}_J^A \otimes \hat{I}_B, \hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B] = [\hat{Q}_J^A, \hat{Q}_J^A] \otimes \hat{Q}_K^B, \quad (A.3)$$

$$[\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B, \hat{I}_A \otimes \hat{Q}_K^B] = \hat{Q}_J^A \otimes [\hat{Q}_K^B, \hat{Q}_K^B], \quad (A.4)$$

$$[\hat{Q}_J^A \otimes \hat{I}_B, \hat{I}_A \otimes \hat{Q}_K^B] = 0, \quad (A.5)$$

$$[\hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B, \hat{Q}_J^A \otimes \hat{Q}_K^B] = \frac{1}{2} [\hat{Q}_J^A, \hat{Q}_J^A] \otimes [\hat{Q}_K^B, \hat{Q}_K^B] + \frac{1}{2} [\hat{Q}_J^A, \hat{Q}_J^A]_+ \otimes [\hat{Q}_K^B, \hat{Q}_K^B]. \quad (A.6)$$

**Appendice B. Hamiltonien du Système Composé**

$$\hat{H} = \frac{1}{n_A n_B} \text{Tr} \hat{H} \cdot \hat{I}^A \otimes \hat{I}^B + \hat{H}'^A \otimes \frac{\hat{I}^B}{\sqrt{n_B}} + \frac{\hat{I}^A}{\sqrt{n_A}} \otimes \hat{H}'^B + \sum_{j=1}^{n_A^2-1} \sum_{k=1}^{n_B^2-1} H_{jK}^{AB} \hat{Q}_j^A \otimes \hat{Q}_k^B, \quad (\text{B.1})$$

avec

$$\hat{H}'^A = \sum_j H_j^A \hat{Q}_j^A, \quad (\text{B.2})$$

$$H_j^A = \text{Tr}[\hat{H}(\hat{Q}_j^A \otimes (I^B/\sqrt{n_B})] \quad (\text{B.3})$$

$$= \text{Tr}_A(H_j^A \hat{Q}_j^A). \quad (\text{B.3'})$$

De même:

$$\hat{H}'^B = \sum_k H_k^B \hat{Q}_k^B, \quad (\text{B.4})$$

$$H_k^B = \text{Tr}[\hat{H}[(\hat{I}^A/\sqrt{n_A}) \otimes \hat{Q}_k^B]] \quad (\text{B.5})$$

$$= \text{Tr}_B(\hat{H}'^B \hat{Q}_k^B). \quad (\text{B.5'})$$

On a aussi

$$H_{jK}^{AB} = \text{Tr}[\hat{H}(\hat{Q}_j^A \otimes \hat{Q}_k^B)]. \quad (\text{B.6})$$

*Remarque*

L'hamiltonien du système composé est habituellement écrit sous la forme:

$$\hat{H} = \hat{H}^A \otimes \hat{I}^B + \hat{I}^A \otimes \hat{H}^B + \hat{H}^{AB}. \quad (\text{B.7})$$

En comparant aux formules précédentes, on voit que l'on a:

$$\hat{H}^A = \hat{H}'^A/\sqrt{n_B}, \quad (\text{B.8})$$

$$\hat{H}^B = \hat{H}'^B/\sqrt{n_A}. \quad (\text{B.9})$$

**Appendice C. Éléments de la Matrice D'Évolution  $\hat{\Omega}$**

I. Les sous-matrices figurant dans la forme (29) de  $\hat{\Omega}$  ont les expressions suivantes où figurent les composantes de l'hamiltonien indiquées dans l'appendice B.

$$(a) \quad \hat{\Omega}_A^A = -\frac{1}{\hbar \sqrt{n_B}} \sum_{j=1}^{n_A^2-1} H_j^A \hat{\Gamma}_j^A, \quad (\text{C.1})$$

ou encore

$$\hat{\Omega}_A^A = -\frac{1}{\hbar} \sum_j H_j^A \hat{\Gamma}_j^A. \quad (\text{C.1'})$$

$\hat{\Gamma}_j^A$  est la matrice antisymétrique formée à partir des constantes de structure  $C_{j,r}^A$  de l'algèbre de Lie su ( $n_A$ ). [Voir II, formules (21)(36)].

(b) De même:

$$\hat{\Omega}_B^B = -\frac{1}{\hbar} \sum_{K=1}^{n_B^2-1} H_K^B \hat{\Gamma}_K^B, \quad (C.2)$$

où  $\hat{\Gamma}_K^B$  est la matrice antisymétrique formée à partir des constantes de structure  $C_{K'KK}^B$  de l'algèbre  $\mathfrak{su}(n_B)$ .

(c) La matrice rectangulaire  $\hat{\Omega}_{AB}^A$  a les éléments matriciels suivants (il convient de remarquer que les colonnes sont numérotées par deux indices, l'un relatif à  $S_0^A$ , l'autre à  $S_0^B$ ).

$$(\hat{\Omega}_{AB}^A)_{J,J'K} = \frac{1}{\hbar \sqrt{n_B}} \sum_{J'} C_{JJ'J'}^A H_{J'K}^{AB}. \quad (C.3)$$

On voit facilement que l'on a:

$$(\hat{\Omega}_{AB}^A)_{J,J'K} = -(\hat{\Omega}_{AB}^A)_{J',JK}. \quad (C.3')$$

(d) On a de même la matrice rectangulaire  $\hat{\Omega}_{AB}^B$  d'éléments

$$(\hat{\Omega}_{AB}^B)_{K,J'K'} = \frac{1}{\hbar \sqrt{n_A}} \sum_{K'} C_{KK'K}^B H_{J'K'}^{AB}, \quad (C.4)$$

$$= -(\hat{\Omega}_{AB}^B)_{K',JK}. \quad (C.4')$$

(e) Pour exprimer la matrice carrée  $\hat{\Omega}_{AB}^{AB}$ , on a besoin, à côté des matrices antisymétriques du type  $\hat{\Gamma}$ , de matrices symétriques  $\hat{\Delta}$  qui sont construites à partir des composantes, dans une  $F$ -base, des anticommutateurs de deux éléments de la base.

Pour  $S_0^A$  par exemple, on peut ainsi écrire [9]

$$[\hat{Q}_J^A, \hat{Q}_{J'}^A]_+ = \frac{2}{n_A} \delta_{JJ'} \hat{I}^A + \sum_{J''=1}^{n_A^2-1} D_{JJ''}^A \hat{Q}_{J''}^A, \quad (C.5)$$

d'où

$$D_{JJ''}^A = \text{Tr}(\hat{Q}_J^A [\hat{Q}_{J''}^A, \hat{Q}_{J''}^A]_+). \quad (C.6)$$

On vérifie facilement que  $D_{JJ''}^A$  est complètement symétrique par rapport à ses trois indices (Rappelons que les constantes de structure  $C_{JJ''}^A$  sont complètement antisymétriques).

On définit alors les matrices symétriques  $\hat{\Delta}_J^A$  d'éléments

$$(\hat{\Delta}_J^A)_{JJ''} = D_{JJ''}^A. \quad (C.7)$$

La matrice  $\hat{\Delta}_K^B$  d'éléments  $D_{KK'K''}^B$  est définie de manière analogue à partir des anticommutateurs des éléments de la  $F$ -base  $\{\hat{Q}_K^B\}$  de  $\mathfrak{su}(n_B)$ .

On peut alors écrire  $\Omega_{AB}^{AB}$  sous la forme

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_{AB}^{AB} = & -\frac{1}{\hbar} \sum_{J=1}^{n_A^2-1} (\hat{\Gamma}_J^A \otimes \hat{I}^B) H_J^A - \frac{1}{\hbar} \sum_{K=1}^{n_B^2-1} (\hat{I}^A \otimes \hat{\Gamma}_K^B) H_K^B \\ & - \frac{1}{2\hbar} \sum_J \sum_K (\hat{\Gamma}_J^A \otimes \hat{\Delta}_K^B + \hat{\Delta}_J^A \otimes \hat{\Gamma}_K^B) H_{JK}^{AB}. \end{aligned} \quad (C.8)$$

II. Lorsque l'hamiltonien "appartient" aux sous-algèbres de Lie su ( $m_A$ ) et su ( $m_B$ ), la matrice d'évolution globale peut être écrite sous la forme (voir formule 53):

$$\hat{\Omega} = \hat{\Omega}' \oplus \hat{\Omega}'_{(A)} \oplus \hat{\Omega}'_{(B)} \oplus \hat{\Omega}'_{A'B'}, \quad (C.9)$$

avec les matrices partielles antisymétriques

$$\hat{\Omega}' = \begin{pmatrix} \hat{\Omega}'_A & 0 & \hat{\Omega}'_{A'B'} \\ 0 & \hat{\Omega}'_{B'} & \hat{\Omega}'_{A'B'} \\ -\widetilde{\hat{\Omega}'_{A'B'}} & -\widetilde{\hat{\Omega}'_{A'B'}} & \hat{\Omega}'_{A'B'} \end{pmatrix}, \quad (C.10)$$

$$\hat{\Omega}'_{(A)} = \begin{pmatrix} \hat{\Omega}'_A & \hat{\Omega}'_{A'B'} \\ -\widetilde{\hat{\Omega}'_{A'B'}} & \hat{\Omega}'_{A'B'} \end{pmatrix}, \quad (C.11)$$

$$\hat{\Omega}'_{(B)} = \begin{pmatrix} \hat{\Omega}'_{B'} & \hat{\Omega}'_{A'B'} \\ -\widetilde{\hat{\Omega}'_{A'B'}} & \hat{\Omega}'_{A'B'} \end{pmatrix}. \quad (C.12)$$

### Références

- [1] U. Fano, Rev. Mod. Phys. **29**, 74 (1957).
- [2] J. M. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1968), Chap. 11.
- [3] E. G. Beltrametti et G. Cassinelli, *The Logic of Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1981), Chap. 7.
- [4] U. Fano, Rev. Mod. Phys. **55**, 855 (1983).
- [5] J. Tillieu et A. Van Groenendael, Int. J. Quantum Chem. **23**, 1807 (1983).
- [6] J. Tillieu et A. Van Groenendael, Int. J. Quantum Chem. **23**, 1817 (1983).
- [7] J. Tillieu et A. Van Groenendael, Int. J. Quantum Chem., **26**, 479 (1984).
- [8] F. T. Hioe et J. H. Eberly, Phys. Rev. Lett. **47**, 838 (1981).
- [9] Par exemple, H. Bacry, *Leçons sur la Théorie des Groupes et les Symétries des Particules Élémentaires* (Gordon-Breach, Dunod, 1967).
- [10] H. Spohn, Rev. Mod. Phys. **52**, 569 (1980).

Received August 8, 1984

Accepted for publication December 14, 1984

## V - EVOLUTION NON HAMILTONIENNE

Nous avons vu au chapitre précédent que, même dans le cas où l'évolution d'un système est déterminée par un hamiltonien, il n'en est en général pas de même pour ses sous-systèmes. Ce cas se présente fréquemment. Par exemple, dans un gaz, il est usuel d'introduire un opérateur-densité à une particule, beaucoup plus facilement utilisable que l'opérateur-densité du gaz tout entier.

L'équation d'évolution de cet opérateur-densité réduit peut a priori être très compliquée. Une approximation souvent acceptable consiste à admettre une équation linéaire du premier ordre pour les éléments matriciels d'un tel opérateur  $\hat{\rho}$ . Cela correspond à l'équation de Redfield citée dans l'article VI qui suit. Le commutateur avec  $\hat{H}$  est en fait un opérateur linéaire sur  $\hat{\rho}$

$$[\hat{H}, \hat{\rho}]_{jk} = \sum_{\ell} (H_{j\ell} \rho_{\ell k} - H_{\ell k} \rho_{j\ell})$$

ce qui définit un super-opérateur  $\hat{S}$  par

$$S_{jk, \ell m} = H_{j\ell} \delta_{km} - H_{mk} \delta_{j\ell} \quad (1)$$

Dans l'article VI cet opérateur a été inclus dans  $\hat{R}$ , de sorte que le super-opérateur  $\hat{R}$  pour lequel les formules sont établies donne l'équation d'évolution

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \hat{R} \hat{\rho} \quad (2)$$

Le superopérateur est bien entendu soumis à certaines restrictions pour que la solution soit un opérateur-densité. Transformer cette équation en une équation portant sur le vecteur de cohérence correspondant satisfait immédiatement les conditions sur la trace et l'hermiticité.

Il est à noter que l'équation qui était linéaire pour  $\hat{\rho}$  ne l'est plus pour le vecteur de cohérence  $\vec{P}$ . En effet, elle est devenue

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \hat{M}\vec{P} + \vec{N} \quad (3)$$

Cependant une combinaison linéaire quelconque d'opérateurs  $\hat{\rho}$  n'a pas de sens physique. Une combinaison ayant un sens physique est le mélange statistique qui correspond à une combinaison linéaire telle que la somme des coefficients, tous non-négatifs, soit 1. Cette opération sur les opérateurs-densités correspond à la même opération, avec les mêmes poids statistiques, sur les vecteurs de cohérence. Si les constituants du mélange satisfont l'équation (3), on constate que, dans ce cas, le mélange satisfait la même équation. Deux problèmes doivent maintenant être résolus. Le premier d'entre eux consiste à trouver à quelle condition sur la matrice  $\hat{M}$  et le vecteur  $\vec{N}$ , le domaine de cohérence  $\bar{D}$  sera conservé dans l'évolution. Le second consiste à séparer les termes de cette équation en termes susceptibles de recevoir séparément une interprétation physique.

Dans l'article VI qui suit, nous utilisons les critères de définition du domaine  $\bar{D}$  des vecteurs de cohérence, obtenus au chapitre II, dans l'article IV. Nous obtenons le critère suivant pour que le domaine  $\bar{D}$  soit conserné :

*Il faut et il suffit que, pour toute paire d'états purs orthogonaux  $\vec{p}^{(\alpha)}$  et  $\vec{p}^{(\beta)}$ , on ait*

$$\vec{p}^{(\alpha)} \cdot \hat{M}\vec{p}^{(\beta)} + \vec{p}^{(\alpha)} \cdot \vec{N} > 0 \quad (4)$$

Rappelons ici que des états orthogonaux ne sont pas représentés par des vecteurs de cohérence orthogonaux. Nous avons montré, dans

l'appendice B, que, dans ce cas, le produit scalaire est

$$\vec{p}^{(\alpha)} \cdot \vec{p}^{(\beta)} = -n$$

Par ailleurs, chaque sous-algèbre de Cartan  $\mathcal{E}_c$  de  $\mathcal{E}_r$  est engendrée par un ensemble de  $n$  états purs orthogonaux qui sont les sommets d'un des simplexes réguliers considérés, au chapitre II, dans l'article IV. Pour chaque ensemble de  $n$  états orthogonaux, on a alors la relation

$$\sum_{\alpha=1}^n \vec{p}^{(\alpha)} = 0$$

car le centre du simplexe est le vecteur nul. Cette propriété a été utilisée pour déduire de la condition nécessaire et suffisante (4), deux relations nécessaires mais non suffisantes. Ces relations sont plus simples, en ce sens qu'elles ne concernent qu'un état pur à la fois. Elles ont été établies dans l'article VI sous la forme suivante :

$$\vec{p} \cdot \vec{M}\vec{p} \ll -\vec{p} \cdot \vec{N} \tag{5}$$

$$\vec{p} \cdot \vec{M}\vec{p} \ll (n-1)\vec{p} \cdot \vec{N} \tag{6}$$

On en déduit immédiatement que l'on doit avoir, pour tout état pur,

$$\vec{p} \cdot \vec{M}\vec{p} \ll -[\vec{p} \cdot \vec{N}] \ll 0 \tag{7}$$

### Cas $n = 2$

A partir de ces résultats, nous allons déterminer, dans le cas  $n = 2$ , les couples  $(\vec{M}, \vec{N})$  qui définissent une loi d'évolution positive.

Nous savons déjà (cf. article IV, au chapitre II) que, dans ce cas, les états purs sont représentés par les vecteurs  $\vec{p}$  de module  $\sqrt{2}$ . Deux états purs orthogonaux sont représentés par des vecteurs opposés. Les couples  $\vec{p}^{(\alpha)}, \vec{p}^{(\beta)}$  d'états purs sont les couples  $\vec{p}, -\vec{p}$  tels que  $\|\vec{p}\| = \sqrt{2}$ . La relation (4) prend donc la forme

$$\|\vec{P}\| = \sqrt{2} \Rightarrow -\vec{P} \cdot \vec{M}\vec{P} - \vec{P} \cdot \vec{N} \geq 0 \quad (8)$$

Cette équation équivaut à (7). Dans le cas général ( $n > 2$ ), la relation (4) serait évidemment beaucoup plus restrictive que (7). Nous observons aussi que la condition (8) ne porte que sur la partie symétrique de  $\vec{M}$ . Nous avons remarqué, dans le paragraphe III de l'article IV, au chapitre II, que la partie hamiltonienne de la loi d'évolution est sans influence sur son caractère positif. Dans le cas  $n = 2$ , un hamiltonien  $\hat{H}$  (de trace nulle) peut toujours être écrit suivant (III-4)

$$\hat{H} = \frac{1}{n} \sum_J h_J \hat{Q}_J \quad (9)$$

La F-base choisie peut être la F-base standard construite à partir des matrices de Pauli (\*)

$$\begin{aligned} \hat{Q}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \hat{Q}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \hat{Q}_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10)$$

On en déduit suivant (II-7) un opérateur d'évolution hamiltonienne

$$\hat{\Omega} = -\frac{1}{2\hbar} \sum_J h_J \hat{\Gamma}_J \quad (11)$$

agissant sur  $\vec{\xi}_r$ . Les opérateurs  $\hat{\Gamma}_J$  sont définis à partir de (III-1) et (III-2)

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_1 &= \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{\Gamma}_2 &= \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \hat{\Gamma}_3 &= \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (12)$$

---

(\*) L'ordre de ces matrices est celui impliqué par les conventions de l'appendice B

Ces trois matrices forment une base de l'espace des matrices 3x3 anti-symétriques. Les égalités (9) et (11) établissent une correspondance entre les opérateurs hamiltoniens sur  $\mathcal{H}$  et les matrices antisymétriques sur  $\mathcal{E}_r$ . Puisque la partie hamiltonienne de l'équation d'évolution est sans influence dans le problème étudié, nous considérerons désormais uniquement des matrices  $\hat{M}$  symétriques. Cette simplification est valable uniquement pour  $n = 2$ . Si  $n > 2$ , certaines matrices antisymétriques doivent être conservées. En effet, les matrices hamiltoniennes  $\Omega$  données par (11) forment un espace de dimension  $n^2 - 1$ , alors que les matrices antisymétriques forment un espace de dimension plus grande  $\frac{(n^2-1)(n^2-2)}{2}$ . Une matrice symétrique possède une base orthonormée de vecteurs propres et les valeurs propres associées sont réelles. Nous numérotons les valeurs propres de  $\hat{M}$  dans l'ordre

$$m_1 \leq m_2 \leq m_3$$

et utilisons les vecteurs propres comme base de l'espace  $\mathcal{E}_r$ . Le problème est alors exprimé par

$$\sum_{j=1}^3 P_j^2 = 2 \Rightarrow \sum_{j=1}^3 (m_j P_j^2 + P_j N_j) \leq 0 \quad (13)$$

De la relation (13), nous pouvons immédiatement déduire, en prenant un seul  $P_j$  non nul (égal à  $\pm \sqrt{2}$ ), la relation simple

$$2 m_j \pm N_j \sqrt{2} \leq 0$$

ou encore

$$m_j \leq -\frac{|N_j|}{\sqrt{2}} \leq 0 \quad (14)$$

Les valeurs propres de  $\hat{M}$  sont donc négatives ou nulles.

Cette relation nécessaire est utile car elle est beaucoup plus simple que la condition nécessaire et suffisante obtenue plus loin.

Nous restreignons encore le problème en introduisant les temps de relaxation  $\tau_1, \tau_2, \tau_3$ , relatifs aux éléments  $\rho_{11}, \rho_{22}$  et  $\rho_{12}$ , et en supposant l'élément  $\rho_{12}$  non couplé avec les autres par relaxation. Nous obtenons alors les équations de Bloch [BLO,46], [BLO,52]. D'après

une remarque précédente, la partie non-hamiltonienne de l'équation d'évolution est la seule partie à considérer ; elle peut alors être écrite

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{11}}{dt} &= -\frac{\rho_{11}}{\tau_1} + \frac{\rho_{22}}{\tau_2} \\ \frac{d\rho_{22}}{dt} &= \frac{\rho_{11}}{\tau_1} - \frac{\rho_{22}}{\tau_2} \\ \frac{d\rho_{12}}{dt} &= -\frac{\rho_{12}}{\tau_3} \end{aligned} \quad (15)$$

Les opérateurs  $\hat{Q}_j$  sont pris égaux à

$$\hat{Q}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} ; \quad \hat{Q}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \hat{Q}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Les formules (27) de l'article IV donnent alors la matrice  $\hat{M}$  et le vecteur  $\vec{N}$

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\tau_3} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\tau_3} \end{pmatrix} \quad \vec{N} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

en posant

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \quad \text{et} \quad N = \sqrt{2} \left( \frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2} \right) \quad (17)$$

Suivant les appellations utilisées dans la théorie de la résonance magnétique,  $\tau$  est le temps de relaxation longitudinal,  $\tau_3$  est le temps de relaxation transversal. La relation (13) à vérifier se réduit à une inégalité qui doit être vérifiée pour toutes les valeurs de la seule variable  $P_1$ , appartenant à l'intervalle  $[-\sqrt{2}, \sqrt{2}]$

$$\left( \frac{1}{\tau_3} - \frac{1}{\tau} \right) P_1^2 + P_1 N - \frac{2}{\tau_3} \leq 0, \quad \forall P_1 \in [-\sqrt{2}, \sqrt{2}] \quad (18)$$

Pour obtenir cette relation, nous avons tenu compte de l'égalité  $\bar{P}^2 = 2$ . Nous avons montré en (14) qu'une condition nécessaire est  $\tau_3 > 0$ , ce qui permet de n'avoir que deux paramètres indépendants. La relation (18) devient

$$\alpha P_1^2 + \beta P_1 - 2 \leq 0 \quad , \quad \forall P_1 \in [-\sqrt{2}, \sqrt{2}] \quad (19)$$

$$\alpha = 1 - \frac{\tau_3}{\tau} \quad , \quad \beta = \sqrt{2} \left( \frac{\tau_3}{\tau_1} - \frac{\tau_3}{\tau_2} \right)$$

L'étude du trinôme figurant dans (14) conduit à distinguer deux domaines dans lesquels (19) est vérifiée. Le premier (figure 1) est tel que l'on ait

$$-1 \leq \alpha \leq 1 \quad \text{et} \quad |\beta| \leq \sqrt{2} (1-\alpha)$$

tandis que le second (figure 2) est défini par

$$\beta^2 \leq -8\alpha$$

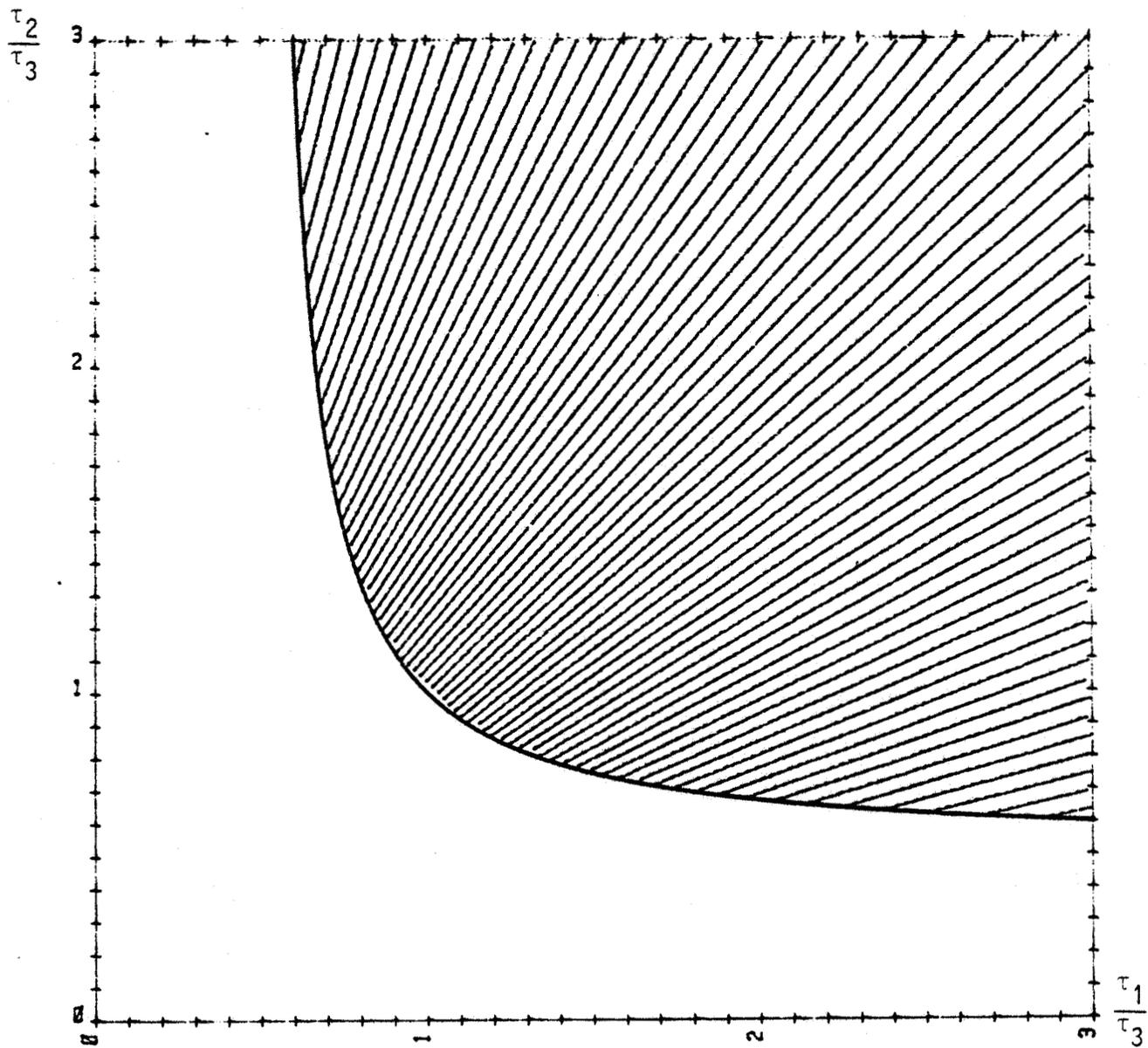
Ces deux domaines se recouvrent d'ailleurs partiellement (figure 3). En réintroduisant les temps  $\tau_1, \tau_2, \tau_3$ , le premier domaine est défini par

$$\frac{\tau_3}{\tau_1} + \frac{\tau_3}{\tau_2} \leq 2 \quad (20)$$

et le second par

$$\left( \frac{\tau_3}{\tau_1} - \frac{\tau_3}{\tau_2} \right)^2 \leq 4 \frac{\tau_3}{\tau_1} + 4 \frac{\tau_3}{\tau_2} - 4 \quad (21)$$

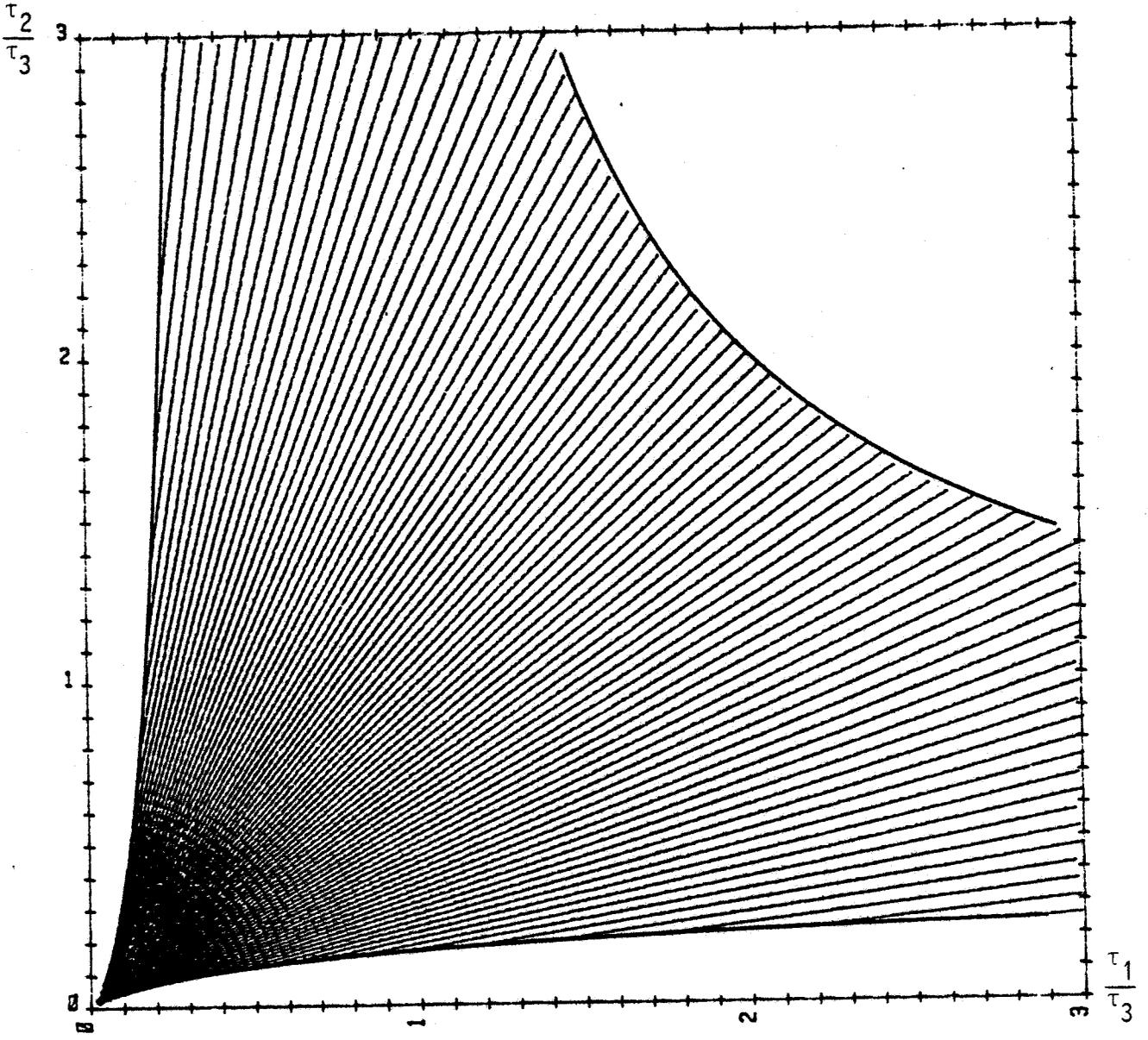
En utilisant comme variables  $\frac{\tau_1}{\tau_3}$  et  $\frac{\tau_2}{\tau_3}$ , l'égalité dans (20) décrit la branche positive d'une hyperbole d'asymptotes  $\frac{\tau_1}{\tau_3} = \frac{1}{2}$  et  $\frac{\tau_2}{\tau_3} = \frac{1}{2}$ . Le domaine autorisé par (20) est toute la partie du plan située au-dessus de cette hyperbole. L'égalité dans (21) décrit une courbe à trois branches dont les asymptotes sont les mêmes que celles de l'hyperbole. Le domaine autorisé par (21) est l'intérieur de cette courbe et contient entièrement la branche d'hyperbole précédente. La figure 3 décrit ces domaines. On constate que deux zones sont exclues pour lesquelles l'un des



domaine  $|\alpha| \leq 1$   
 $|\beta| \leq \sqrt{2} (1-\alpha)$

FIGURE 1

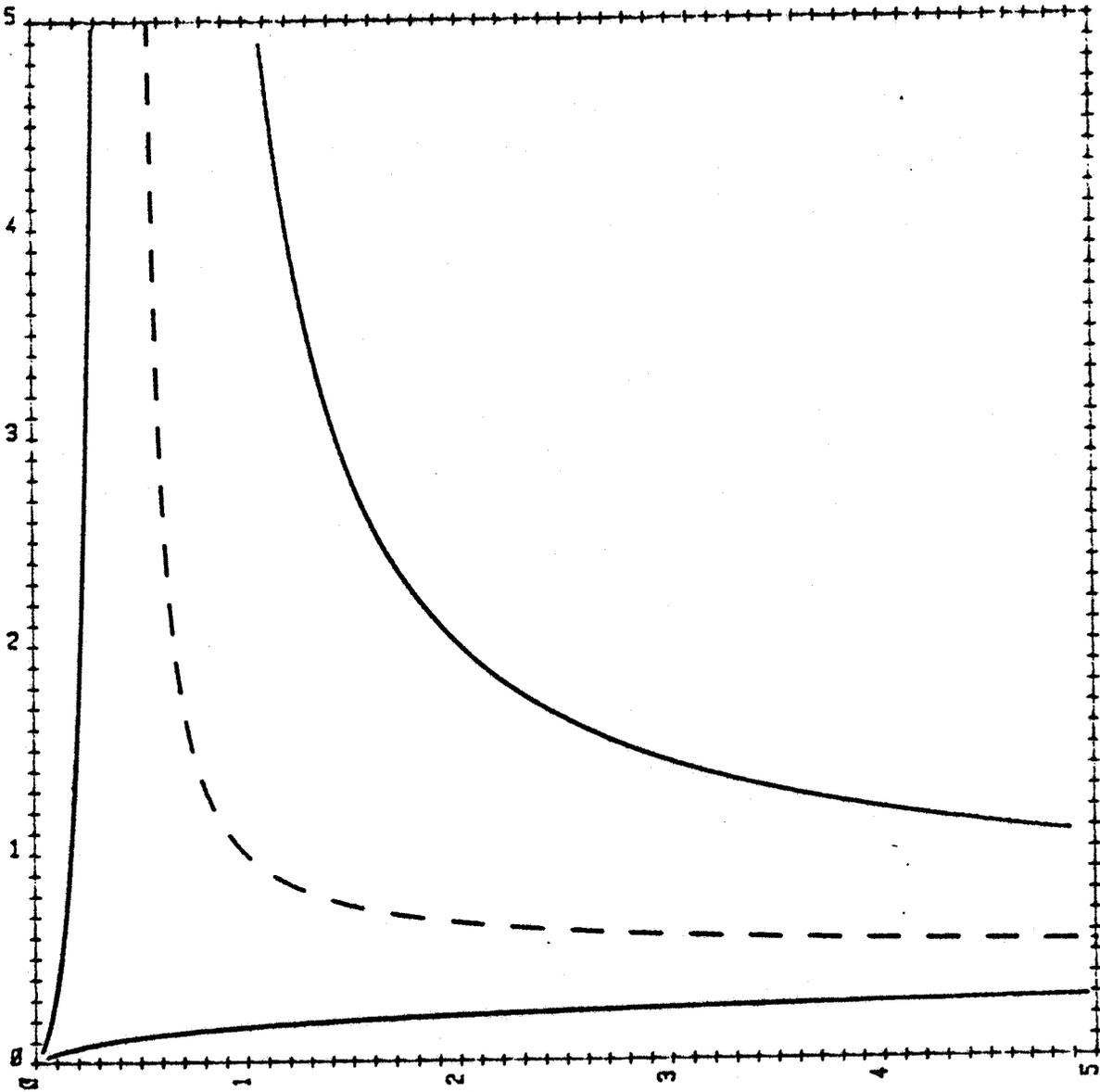




domaine  $|\beta^2| \ll -8\alpha$

FIGURE 2





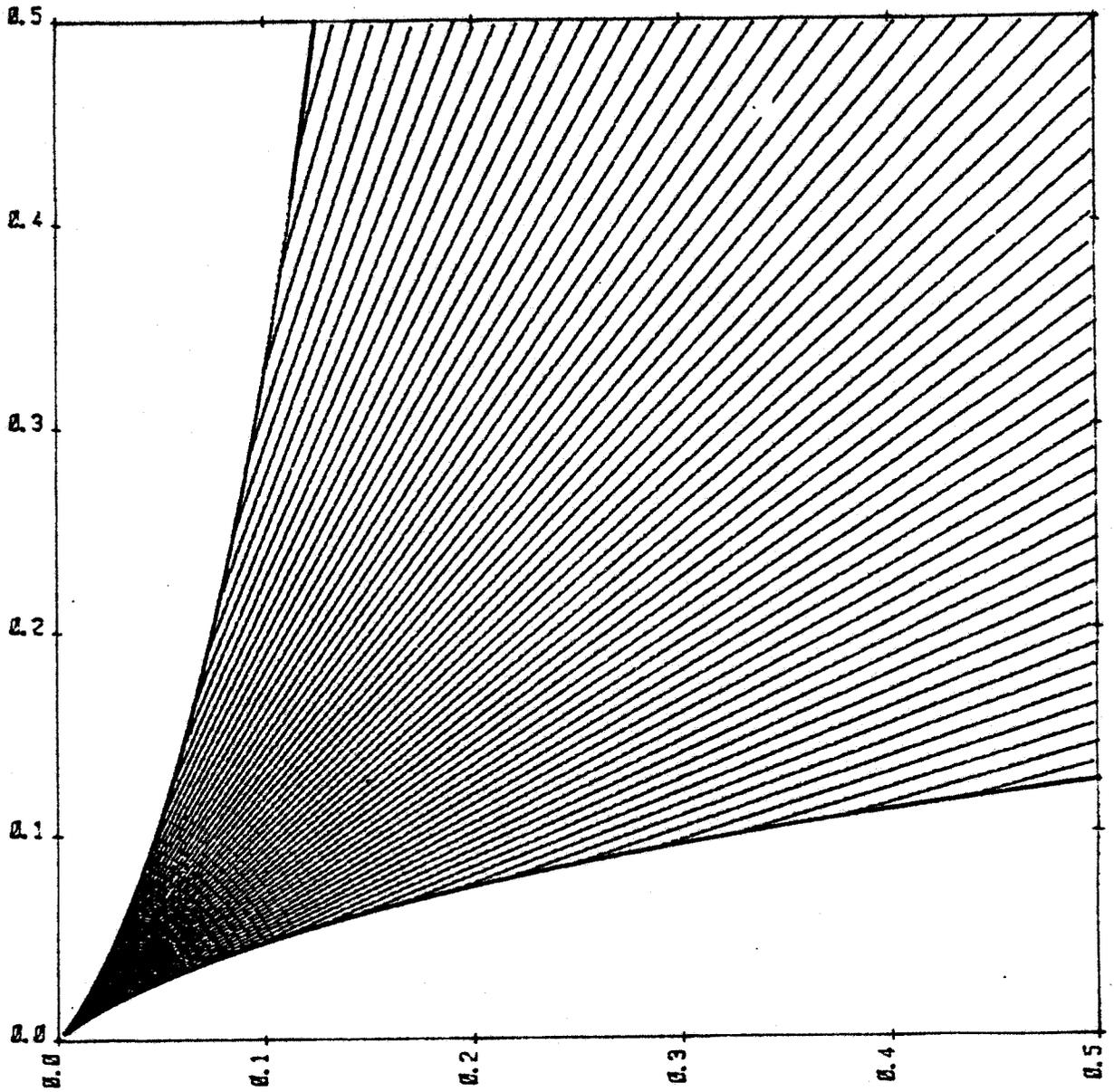
Superposition des deux domaines :

le premier est limité par la courbe pointillée

le second est limité par la courbe pleine à 3 branches.

FIGURE 3





*Le domaine et les droites de température constante.*

FIGURE 4



rapports  $\frac{\tau_1}{\tau_3}$  et  $\frac{\tau_2}{\tau_3}$  est trop petit. Finalement, nous obtenons les résultats suivants qui, à notre connaissance, ne sont pas indiqués par les auteurs utilisant cette méthode :

\*  $\frac{\tau_1}{\tau_3} > \frac{1}{2}$  et  $\frac{\tau_2}{\tau_3} > \frac{1}{2}$  est toujours acceptable

\* si  $\frac{\tau_1}{\tau_3} < \frac{1}{2}$ ,  $\frac{\tau_2}{\tau_3}$  doit être compris entre deux valeurs

\* si  $\frac{\tau_2}{\tau_3} < \frac{1}{2}$ ,  $\frac{\tau_1}{\tau_3}$  doit être compris entre deux valeurs

Les courbes limites sont données sous forme paramétrique par

$$\frac{\tau_1}{\tau_3} = \frac{2}{(1+D)^2}, \quad \frac{\tau_2}{\tau_3} = \frac{2}{(1-D)^2} \quad \text{avec } |D| > 1$$

La branche correspondant à  $|D| < 1$  n'est pas une limite.

Usuellement, le rapport  $\frac{\tau_1}{\tau_2}$  est déterminé par la température du système. Sur le graphe de la figure 4, les droites passant par l'origine correspondent à une température constante. En excluant les cas sans relaxation transversale ( $\tau_3 = \infty$ ) ou de température infinie ( $\tau_1 = \tau_2$ ), et en prenant  $\tau_3$  comme unité de temps, on constate l'existence d'une limite inférieure pour les valeurs de  $\tau_1$  et  $\tau_2$  à une température donnée. Lorsque la température augmente, cette limite diminue. Elle disparaît seulement pour une température infinie ( $\tau_1 = \tau_2$ ). Il y a, pour les temps de relaxation, une symétrie complète entre les états à température positive et ceux à température négative, il suffit d'échanger  $\tau_1$  et  $\tau_2$ . Lorsque la température tend vers 0, la limite inférieure tend vers  $\frac{1}{2}$  pour l'un de ces temps de relaxation et devient très grande pour l'autre.

Nous reprenons maintenant le système général à 2 niveaux. Il comporte a priori 6 paramètres (les 3 valeurs propres  $m_j$ , et les 3  $N_j$ ) au lieu de 3. La méthode graphique précédente n'est plus applicable.

Nous cherchons d'abord les extremums de

$$\sum_{j=1}^3 (m_j P_j^2 + P_j N_j) \quad (23)$$

pour des vecteurs  $\vec{P}$  vérifiant la condition

$$\sum_{j=1}^3 P_j^2 = 2 \quad (24)$$

Exprimer que ces extremums doivent être négatifs permet de résoudre le problème. Il serait suffisant d'imposer que les maximums soient négatifs mais distinguer les maximums des autres extremums n'apporte aucune simplification de calcul. Pour chercher les extremums, nous différencions (23) et (24) et introduisons le multiplicateur de Lagrange  $\lambda$ . Le système d'équations obtenu est alors :

$$2(m_j - \lambda) P_j + N_j = 0 \quad (25)$$

Le coefficient  $\lambda$  est déterminé par (24). Nous traitons à part le cas où  $\lambda$  est égal à l'un des  $m_j$ , ce qui ne peut avoir lieu que si le  $N_j$  correspondant est nul. Pour les autres valeurs de  $\lambda$ , nous avons

$$P_j = - \frac{N_j}{2(m_j - \lambda)} \quad (26)$$

La valeur de l'expression (23) devient

$$\frac{1}{4} \sum_{j=1}^3 \frac{N_j^2}{(m_j - \lambda)^2} \quad (27)$$

Le coefficient  $\lambda$  est défini par

$$\sum_{j=1}^3 \frac{N_j^2}{(m_j - \lambda)^2} = 8 \quad (28)$$

qui donne en général une équation de degré 6 en  $\lambda$ .

Voyons maintenant à quelle condition  $\lambda$  peut être égal à l'un des  $m_j$  et ce que cela implique. Lorsque plusieurs  $m_j$  sont égaux, ce sont tous les  $N_j$  correspondants qui doivent être nuls pour que  $\lambda = m_j$ .

Ces cas dégénérés correspondent à l'exemple détaillé ci-dessus avec  $m_J = -\frac{1}{\tau_3}$ . Le ou les  $P_J$  sont éliminés de (23) au moyen de (24), ce qui donne une expression dont les variables  $P_K$  varient indépendamment tant que la solution est telle que

$$\sum_{\substack{K \\ m_K \neq m_J}} P_K^2 < 2$$

Le cas extrême où la somme vaut 2 n'est pas considéré ici, car il donne  $P_J = 0$  et une équation de type (25) où ne figurent que les  $P_K$  tels que  $m_K \neq m_J$ , c'est-à-dire le cas où  $\lambda \neq m_J$ . Nous obtenons

$$P_K = \frac{N_K}{2(m_J - m_K)}, \quad m_K \neq m_J,$$

ce qui est possible à condition que

$$\sum_{\substack{K \\ m_K \neq m_J}} \frac{N_K^2}{(m_J - m_K)^2} < 8$$

On a alors

$$\sum_{\substack{K' \\ m_{K'} \neq m_J}} P_{K'}^2 = 2 - \sum_{\substack{K \\ m_K \neq m_J}} \frac{N_K^2}{4(m_K - m_J)^2}$$

et l'expression (23) est devenue ( $N_J = 0$ )

$$2 m_J - \frac{1}{4} \sum_{\substack{K \\ m_K \neq m_J}} \frac{N_K^2}{(m_K - m_J)^2} \quad (29)$$

Finalement, il faut et il suffit que l'on ait

- soit l'expression (27) négative pour  $\lambda$  vérifiant (28)
- soit l'expression (29) négative pour  $N_J = 0$ .

Dans la base utilisée, l'équation d'évolution dans  $\mathcal{E}_3$  est

$$\frac{dP_J}{dt} = -\frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (\vec{h} \wedge \vec{P})_J + m_J P_J + N_J \quad (30)$$

Le terme hamiltonien (en  $\vec{h}$ ) a été rétabli pour la généralité.  $\vec{h}$  et son action sur  $\vec{P}$  ont été définis en (9) et (11). Nous avons déjà remarqué que le caractère positif ou non de l'évolution ne dépend pas de  $\vec{h}$ , que nous continuerons donc à prendre nul. Si l'un des  $m_j$  est nul, la relation (16) ou un raisonnement direct montre que  $N_j$  est nul également. Dans cette direction, il n'y a pas de relaxation vers un état d'équilibre. Pour tous les autres cas

$$\frac{dP_j}{dt} = m_j \left( P_j + \frac{N_j}{m_j} \right)$$

Cette équation décrit un système qui évolue vers un état d'équilibre, puisque  $m_j < 0$  ; l'état d'équilibre est décrit par un vecteur de composantes  $\frac{N_j}{-m_j}$ . La relation (16) impose à ce vecteur de se trouver dans la sphère de rayon  $\sqrt{2}$ , c'est-à-dire de représenter effectivement un état du système. Il sera souvent utile de résoudre le problème pour une température donnée, ce qui impose les valeurs des  $\frac{N_j}{-m_j}$  ; il reste trois paramètres à fixer (les  $N_j$  ou les  $m_j$ ). Si aucune relation ne peut les lier a priori, alors seul un calcul numérique permet de déterminer la surface à 2 dimensions limitant le domaine acceptable des paramètres. La résolution du problème nécessite d'ajouter les solutions de (29) à celles données par le système (27)-(28).

Une autre façon d'utiliser les résultats précédents est la vérification a posteriori selon le schéma qui suit. L'hypothèse principale est la loi linéaire (3) ; elle est complétée éventuellement par quelques autres portant sur les transitions de relaxation. Les composantes restantes de  $\hat{M}$  et  $\vec{N}$  sont alors déterminées indirectement par l'expérience. Si le système (27)-(28) ou (29) est vérifié, les hypothèses sont raisonnables ; sinon, la loi (3), avec ces valeurs de  $\hat{M}$  et  $\vec{N}$  ne peut décrire l'évolution de certains états initiaux. L'une au moins des hypothèses est inadéquate. Il peut être utile de déterminer, à l'aide de (26), les états qui donnent la valeur maximum à l'expression (23), états à propos desquels les hypothèses incorrectes se manifestent au maximum.

Dans le cas où le nombre  $n$  de niveaux est supérieur à 2, le système d'équations et d'inéquations à résoudre est formé de (4) et (B-9) que nous rappelons ici.

Pour tout couple de vecteurs  $\vec{p}$  et  $\vec{p}'$  de  $\mathcal{E}_r$  tel que

$$\vec{p}^2 = \vec{p}'^2 = n(n-1)$$

$$\vec{p} \cdot \hat{\Delta}_J \vec{p} = 2(n-2)P_J, \quad \forall J = 1, \dots, r \quad (\text{B-9})$$

$$\vec{p}' \cdot \hat{\Delta}_J \vec{p}' = 2(n-2)P'_J, \quad \forall J = 1, \dots, r$$

$$\vec{p}' \cdot \hat{\Gamma}_J \vec{p} = 0$$

on doit avoir

$$\vec{p}' \cdot \hat{M} \vec{p} + \vec{p}' \cdot \hat{N} > 0 \quad (4)$$



Cela conduit à chercher tous les minimums du premier membre de (4), en tenant compte de (B-9) et à vérifier l'inégalité pour chacun d'eux. Dans ce calcul numérique, les minimums ne sont pas forcément situés en des points isolés. Ils peuvent former des variétés continues.

Résoudre de tels systèmes dans le cas général semble difficilement envisageable. On peut seulement envisager l'introduction d'hypothèses restreignant le nombre de paramètres à utiliser, ou la vérification a posteriori. Il faut prendre garde dans ce cas au fait qu'une hypothèse inadéquate peut changer complètement la nature du système. Dans l'exemple relatif aux systèmes à 2 niveaux, la valeur de  $\frac{1}{\tau_3}$  peut sembler peu importante si l'on s'intéresse uniquement aux termes diagonaux  $\rho_{11}$  et  $\rho_{22}$ , c'est-à-dire à la composante  $P_1$  du vecteur de cohérence. En fait, une valeur mal choisie peut conduire le vecteur  $\vec{p}$  dans un domaine où il ne définit même plus un opérateur-densité. L'exigence pour un opérateur-densité d'être semi-défini positif est fondamentale. Certains auteurs (voir par exemple [KRA] [DAV] [SPO] [GOR]) proposent, pour l'équation (3), une exigence plus forte que la positivité. L'équation (3) signifie que le système physique étudié est couplé à un réservoir au sens de la mécanique statistique. Si on admet que le système

plus le réservoir forment un nouveau système régi, lui, par une dynamique hamiltonienne, alors l'équation (3) doit être "complètement positive". En description de Heisenberg, cette condition a été exprimée de la façon suivante, soit :

$$\hat{A} \rightarrow T_t(\hat{A})$$

l'évolution de l'opérateur  $\hat{A}$  au cours du temps ; alors, quelle que soit la dimension  $d$ , la loi d'évolution

$$\hat{A} \otimes \hat{I}_d \rightarrow T_t(\hat{A}) \otimes \hat{I}_d$$

doit être positive. Cette condition exprime une certaine indépendance par rapport à la nature du réservoir. Les auteurs précédents ont montré que cela implique, en description de Schrödinger, la forme suivante pour l'équation d'évolution de l'opérateur-densité  $\hat{\rho}$  :

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_{J,K=1}^{n^2-1} X_{JK} \{ [\hat{Q}_J, \hat{\rho} \hat{Q}_K] + [\hat{Q}_J \hat{\rho}, \hat{Q}_K] \} \quad (31)$$

où la matrice d'élément  $X_{JK}$  est une matrice complexe positive. Nous allons maintenant traduire ce résultat dans l'espace  $\vec{\mathcal{E}}_r$  des vecteurs de cohérence. Le terme hamiltonien  $-\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$  donne, comme il a déjà été montré, un terme

$$\sum_{J=1}^{n^2-1} h_J \hat{\Gamma}_J$$

$\hat{H}$  peut être un opérateur hamiltonien quelconque. Par conséquent, les composantes  $h_J$  du vecteur  $\vec{h}$  de  $\vec{\mathcal{E}}_r$  peuvent être des nombres réels quelconques. Pour développer le second terme, nous sommes amenés à séparer la partie réelle de la partie imaginaire de la matrice, soit

$$\hat{X} = \hat{A} + i\hat{B} \quad (32)$$

Une matrice positive est hermitique, nous savons donc que  $\hat{A}$  est symétrique et  $\hat{B}$  antisymétrique. Le calcul des composantes  $M_{KJ}$  et  $N_K$  est effectué à l'aide des formules (27) de l'article VI. Nous obtenons les égalités suivantes :

$$N_K = \sum_{L,M} X_{LM} \text{tr} \{ \hat{Q}_K ([\hat{Q}_L, \hat{Q}_M] + [\hat{Q}_L, \hat{Q}_M]) \}$$

$$= -2i \sum_{L,M} X_{LM} C_{LMK} = -2i \text{tr} (\hat{X} \hat{\Gamma}_K)$$

finalement, comme  $\hat{\Gamma}_K$  est antisymétrique,

$$N_K = 2 \text{tr} (\hat{B} \hat{\Gamma}_K) \quad (33)$$

De même, nous avons

$$M_{KJ} = \sum_{L,M} X_{LM} \text{tr} \{ \hat{Q}_K ([\hat{Q}_L, \hat{Q}_J \hat{Q}_M] + [\hat{Q}_L \hat{Q}_J, \hat{Q}_M]) \}$$

$$= -i \sum_{L,M,R} X_{LM} (\Omega_{JMR} C_{RKL} + \Omega_{LJR} C_{RMK})$$

En séparant les parties réelles et imaginaires, nous obtenons :

$$M_{KJ} = \text{tr} (\hat{A} \hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_K + \hat{B} \hat{\Delta}_J \hat{\Gamma}_K) \quad (34)$$

Appliquons ce résultat aux équations de Bloch du système à 2 niveaux étudié précédemment (15) ou (16). Dans ce cas, le résultat ci-dessus permet de préciser le résultat obtenu par [GOR, 76a], [GOR, 76h], [GOR, 78] pour l'ensemble des systèmes à 2 niveaux.

$$(\hat{\Gamma}_J)_{KL} = \frac{1}{\sqrt{2}} \varepsilon_{KJL} \quad , \quad \hat{\Delta}_J = 0$$

en reportant dans (33) et (34), les matrices  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  et  $\hat{X}$  obtenues sont

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau} + \frac{2}{\tau_3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tau} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\tau} \end{pmatrix} \quad \hat{B} = \frac{N}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau} + \frac{2}{\tau_3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tau} & \frac{iN}{2\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{iN}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{\tau} \end{pmatrix}$$

$$\text{avec } \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{2}{\tau_2} \quad ; \quad N = \sqrt{2} \left( \frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2} \right)$$

Les valeurs propres, qui doivent être non négatives pour que la matrice  $\hat{X}$  soit positive et par conséquent l'évolution complètement positive, sont données par

$$-\frac{1}{\tau} + \frac{2}{\tau_3} \quad , \quad \frac{1}{\tau} \pm \frac{N}{2\sqrt{2}}$$

Les conditions pour que l'évolution soit complètement positive deviennent

$$\frac{\tau_3}{\tau_1} + \frac{\tau_3}{\tau_2} < 2 \quad , \quad \tau_1 > 0 \quad , \quad \tau_2 > 0$$

La courbe limite est l'hyperbole rencontrée dans l'étude précédente (figure 21). La forme du domaine permis est plus simple à exprimer mathématiquement. Le domaine est fortement diminué ; en particulier, il est impossible d'avoir  $\frac{\tau_1}{\tau_3}$  ou  $\frac{\tau_2}{\tau_3}$  inférieur à  $\frac{1}{2}$ .

Puisque la notion de complète positivité a été introduite à l'origine autant pour des raisons de commodité mathématique que pour des raisons physiques, il est tout à fait plausible que la simplification obtenue pour le domaine soit une propriété générale de la complète positivité par rapport à la positivité de l'évolution.

## Usage de l'Algebre de Lie $su(n)$ dans l'Etude des Systemes à $n$ Etats. VI. Equations Linéaires d'Evolution Positive

A. VAN GROENENDAEL

*Laboratoire de Physique Théorique, Université de Lille 1, F-59655 Villeneuve d'Ascq Cédex, France*

### Résumé

Lors de l'étude des systèmes quantiques à  $n$  états, l'évolution des opérateurs-densités n'est en général pas définie par une équation de Liouville mais par une équation plus générale. Cette équation doit conserver la trace, l'hermiticité et le caractère semi-défini positif des opérateurs-densités. Ces trois conditions restreignent les formes possibles d'équation d'évolution. Nous considérons dans cet article des équations linéaires pour des systèmes sans mémoire. En utilisant les deux premières conditions et le formalisme introduit dans les articles précédents, les équations d'évolution prennent la forme d'une équation différentielle du premier ordre, portant sur le "vecteur de cohérence" de dimension  $n^2 - 1$ . La troisième condition fait l'objet de la plus grande partie de l'article. Nous obtenons de plus une décomposition canonique de cette équation en quatre parties qui peuvent être étudiées séparément.

### Abstract

The  $n$ -level quantum systems density-operators evolution is not usually given by the Liouville equation, but by a more general one. This equation must keep density-operators trace, hermiticity, and positiveness. These three conditions restrict the available kinds of evolution equations. In this paper we investigate linear equations for systems without memory effects. By using the first two conditions and the formalism introduced in earlier papers, the evolution equation takes the form of a first order differential equation concerning the  $n^2 - 1$  dimension "coherence-vector." The third one is the essential object of this paper. Moreover, we obtain a canonical splitting of this equation into four parts that may be separately studied.

### I. Introduction

a) On sait depuis longtemps que les états purs d'un système physique ne suffisent pas à décrire tous ses états possibles. Les opérateurs-densités ont été introduits pour étendre cette description. Dans le cas où un système apparaît comme sous-système d'un autre plus grand, il n'est plus a priori nécessairement décrit par un état pur, même si le grand système est dans un état pur. Il peut, par contre, être décrit par un opérateur-densité, quel que soit l'état du grand système.

Pour un système quantique  $S_Q$  dont l'espace des états purs  $H_n$  est de dimension finie  $n$ , (on l'appelle alors système à  $n$  états), une méthode a été introduite dans des articles précédents [1-5]. Elle consiste à utiliser des opérateurs hermitiques, de trace nulle,  $\hat{Q}_J$  ( $J = 1, \dots, r = n^2 - 1$ ), orthonormés au sens de Fano, qui forment

avec l'opérateur identité une base de l'espace des observables de  $S_Q$ . Un opérateur-densité peut alors être écrit:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} \left( \hat{I} + \sum_{j=1}^r P_j \hat{Q}_j \right) \quad (1)$$

Les nombres réels  $P_j$  sont les composantes d'un vecteur  $\mathbf{P}$ , appelé vecteur de cohérence, dans un espace réel euclidien noté  $\bar{E}_r$ , de dimension  $r$ .

b) Un cas particulier important d'évolution a fait l'objet de nombreuses études. Il s'agit des systèmes dont l'évolution est régie par un hamiltonien, en fait ceux dont on peut négliger les interactions avec les autres systèmes quantiques [1, 2, 5-10]. Le hamiltonien peut être pris, sans inconvénient, de trace nulle, ce qui permet de l'écrire [5]:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^r h_j \hat{Q}_j \quad (2)$$

Dans l'espace  $\bar{E}_r$ , une évolution hamiltonienne de  $S_Q$  est décrite par l'équation différentielle

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \hat{\Omega}\mathbf{P} \quad (3)$$

où la matrice  $\hat{\Omega}$  est définie par

$$\hat{\Omega} = \sum_{j=1}^r h_j \hat{\Gamma}_j \quad (4)$$

$\hat{\Gamma}_j$  est la matrice réelle, antisymétrique correspondant à  $\hat{Q}_j$  dans la représentation adjointe de  $su(n)$  [5], (voir aussi l'appendice B).

c) Pour un système  $S_Q$  non isolé, le plus souvent l'évolution n'est plus hamiltonienne. Il est toujours possible d'englober  $S_Q$  dans un système plus grand qui peut être considéré comme isolé et soumis alors à une évolution hamiltonienne, dont l'évolution de  $S_Q$  peut être déduite, par l'intermédiaire de la notion d'opérateur-densité réduit. Nous avons montré dans [8] que l'évolution non-hamiltonienne de cet état réduit obéit à une équation où intervient l'état du système avec lequel  $S_Q$  est couplé.

Il apparaît alors préférable d'étudier ab initio l'évolution d'un système non isolé, sans faire apparaître explicitement le couplage avec un autre système. Une telle étude fait déjà l'objet d'une littérature abondante [11-13]. Une manière de l'aborder pour les systèmes à  $n$  états, consiste à remplacer, dans  $\bar{E}_r$ , l'équation (3) par une équation plus générale. Nous nous proposons, dans cet article, d'examiner quelques aspects de ce problème.

## II. Equations Linéaires D'évolution Positive

a) Il est bien connu que n'importe quel hamiltonien conserve le caractère hermitique semi-défini positif et la trace de l'opérateur-densité. Il s'ensuit que le vecteur  $\mathbf{h}$ , de composantes  $h_j$ , n'est soumis à aucune restriction dans  $\bar{E}_r$ , et que toute matrice  $\hat{\Omega}$

appartenant à la représentation adjointe de  $su(n)$  détermine une équation d'évolution (3) possible pour un système quantique à  $n$  états.

b) Des équations d'évolution plus générales ont été proposées pour les systèmes non-isolés. Par exemple, les équations pilotes (master equations), décrivent assez bien les systèmes présentant une relaxation.

Nous nous bornons à envisager ici des équations linéaires pour des systèmes sans mémoire. De tels systèmes sont, par exemple, étudiés dans [11] et [12]. L'équation d'évolution de l'opérateur-densité est alors de la forme

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = L(\hat{\rho})$$

où  $L$  est un opérateur linéaire agissant sur les matrices  $n \times n$ , ce qu'on appelle parfois un superopérateur [14]. En introduisant les vecteurs de cohérence et en tenant compte de  $\text{tr}(\hat{\rho}) = 1, \forall t$ , donc de  $\text{tr} L(\hat{\rho}) = 0, \forall \hat{\rho}$ , on obtient une équation différentielle d'évolution dans  $\bar{E}$ ,

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \hat{M}\mathbf{P} + \mathbf{N} \quad (5)$$

où  $\mathbf{P}$  est le vecteur de cohérence

$\mathbf{N}$  un vecteur de  $\bar{E}$ ,

$\hat{M}$  une matrice réelle  $r \times r$ .

c) Toutefois, n'importe quel couple  $(\hat{M}, \mathbf{N})$  ne fournit pas nécessairement une évolution acceptable. En effet, si un vecteur  $\mathbf{P}$  représente, à un certain instant  $t$ , un opérateur-densité, il faut que son transformé par l'évolution (5), à tout instant ultérieur, en représente un également. Le formalisme que nous utilisons assure toujours le caractère hermitique et la trace 1 des opérateurs-densités. Pour qu'un vecteur  $\mathbf{P}$  représente un opérateur-densité, il faut et il suffit que l'opérateur construit soit de plus semi-défini positif, c'est-à-dire qu'il soit à l'intérieur du domaine de cohérence  $\bar{D}$  étudié dans [7]. Seules sont donc acceptables les équations (5) qui conservent  $\bar{D}$ . Puisque la propriété servant à définir  $\bar{D}$  est le caractère semi-défini positif des opérateurs-densités, une telle évolution est dite positive [11, 12].

### III. Conditions Générales D'Une Evolution Positive

Nous sommes conduits à chercher les conditions imposées à  $\hat{M}$  et  $\mathbf{N}$  dans (5) pour que le domaine  $\bar{D}$  de  $\bar{E}$ , soit conservé.

Dans le paragraphe V de [7], nous avons indiqué plusieurs conditions équivalentes pour reconnaître si un vecteur  $\mathbf{P}$  de  $\bar{E}$ , appartient à  $\bar{D}$ . Nous allons utiliser la suivante:  $\mathbf{P}$  appartient à  $\bar{D}$  si et seulement si l'on a

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} \geq -n \quad (6)$$

pout tout vecteur  $\mathbf{R}$  représentant un état pur.

Le problème posé peut être mis sous une forme différentielle en remarquant que, pour conserver  $\bar{D}$  au cours du temps, il suffit de le conserver pendant une durée non nulle  $[t, t + \tau]$ , quel que soit  $t$ .

Au premier ordre en  $\tau$ , on peut alors écrire:

$$\mathbf{P}(t + \tau) = \mathbf{P}(t) + \tau \frac{d\mathbf{P}}{dt} \quad (7)$$

et la condition (6) devient, à l'instant  $t + \tau$

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}(t) + \tau \mathbf{R} \cdot \frac{d\mathbf{P}}{dt} \geq -n \quad (8)$$

(8) doit être vérifiée pour tout état pur  $\mathbf{R}$ , pour tout vecteur  $\mathbf{P}(t)$  vérifiant (6) et pour tout  $\tau$  assez petit.

Si  $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}(t)$  est strictement supérieur à  $-n$ , (8) est vérifiée pour  $\tau$  assez petit, quelle que soit la valeur de  $d\mathbf{P}/dt$ . Nous pouvons donc nous borner à considérer seulement le cas

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}(t) = -n \quad (9)$$

La condition (8) peut alors être simplifiée et énoncée sous la forme du critère suivant: pour tout état pur  $\mathbf{R}$  et tout état  $\mathbf{P}(t)$  vérifiant (9), on doit avoir

$$\mathbf{R} \cdot \frac{d\mathbf{P}}{dt} \geq 0 \quad (10)$$

ou encore en utilisant (5)

$$\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{M}}\mathbf{P} + \mathbf{R} \cdot \mathbf{N} \geq 0 \quad (11)$$

Nous allons montrer maintenant qu'il n'est pas nécessaire d'examiner (11) pour tous les états  $\mathbf{P}$  vérifiant (9), mais seulement pour les états purs.

Il est évidemment nécessaire que (11) soit vérifiée pour tous les états purs  $\mathbf{P}$  satisfaisant (9). Montrons que cela est également suffisant.

Pour cela, nous allons montrer que dans le cas où (11) est vérifiée par tout état pur  $\mathbf{P}$  satisfaisant (9), elle est aussi vérifiée par un état  $\mathbf{P}$  quelconque satisfaisant (9).

Soit donc  $\mathbf{R}$  un état pur et  $\mathbf{P}$  un vecteur de  $\bar{D}$  tel que  $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} = -n$ . Nous savons que  $\mathbf{P}$  peut être décrit comme un mélange d'états purs

$$\mathbf{P} = \sum_j \lambda_j \mathbf{P}^{(j)} \quad \text{avec } 0 \leq \lambda_j \leq 1, \sum_j \lambda_j = 1 \quad (12)$$

La condition (9) sur  $\mathbf{P}$  devient

$$\sum_j \lambda_j \mathbf{R} \cdot \mathbf{P}^{(j)} = -n \quad (13)$$

aucun  $\lambda_j$  n'est négatif et la valeur minimum des  $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}^{(j)}$  est  $-n$ . La relation (13) ne peut être vérifiée que si l'on a séparément pour chaque  $\mathbf{P}^{(j)}$  la relation

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}^{(j)} = -n$$

Nous avons supposé que (11) est vérifiée pour les états purs satisfaisant (9). C'est le cas des  $\mathbf{P}^{(j)}$ , on a donc:

$$\forall j, \quad \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{M}}\mathbf{P}^{(j)} + \mathbf{R} \cdot \mathbf{N} \geq 0 \quad (14)$$

En multipliant par  $\lambda_j$  et en faisant la somme sur  $j$ , on constate que (11) est aussi vérifiée pour  $P$ . Comme cette manière de procéder est valable pour tout vecteur  $R$  représentant un état pur et tout vecteur  $P$  de  $\bar{D}$  vérifiant (9), la condition est effectivement suffisante.

Nous avons ainsi obtenu une forme équivalente du critère d'évolution positive:  $\hat{M}$  et  $N$  décrivent une évolution positive si et seulement si, pour tout couple d'états purs  $R$  et  $P$  satisfaisant (9), la relation (11) est vérifiée.

On voit d'après la formule (A-4) de [4], que deux états purs vérifiant (9) sont représentés, dans l'espace  $H_n$  des états purs, par des vecteurs orthogonaux.

D'autre part, on sait que l'espace des observables (de trace nulle)  $E_n$ , isomorphe à  $su(n)$ , possède des sous-algèbres abéliennes maximales, de dimension  $n - 1$ , ses sous-algèbres de Cartan. A ces sous-algèbres correspondent dans  $\bar{E}_r$  des sous-espaces  $\bar{E}_{n-1}^c$  qui ont été étudiés dans [7]. Nous rappelons les résultats suivants: à chaque base orthonormée de  $H_n$ , correspond un sous-espace de type  $\bar{E}_{n-1}^c$  et, réciproquement, à chaque  $\bar{E}_{n-1}^c$ , correspond une base orthonormée de  $H_n$  dont les vecteurs sont définis à une phase près. Nous avons noté  $\bar{E}_{n-1}^{c,v}$  l'espace correspondant à la base  $v$  de  $H_n$ . Dans  $\bar{E}_{n-1}^{c,v}$  les seuls états purs sont les  $n$  vecteurs de  $\bar{E}_r$  correspondant aux vecteurs de la base  $v$  de  $H_n$  [7]. Ils vérifient (9) deux à deux.

Ces propriétés permettent d'énoncer la condition pour qu'une évolution (5) soit positive, sous la forme suivante: la loi d'évolution (5) est positive si et seulement si l'on a, pour tout sous-espace  $\bar{E}_{n-1}^c$  de  $\bar{E}_r$  et pour toute paire d'états purs distincts  $P^{(\alpha)}$  et  $P^{(\beta)}$  de  $\bar{E}_{n-1}^c$

$$(\alpha \neq \beta) \quad P^{(\alpha)} \cdot \hat{M}P^{(\beta)} + P^{(\alpha)} \cdot N \geq 0 \quad (15)$$

Cette relation en implique une autre ne faisant intervenir qu'un seul vecteur au lieu de la paire  $P^{(\alpha)}$ ,  $P^{(\beta)}$ . En effet, nous savons [7] qu'entre les  $n$  états purs  $P^{(\alpha)}$  contenus dans un sous-espace  $\bar{E}_{n-1}^c$  existe la relation

$$\sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)} = 0 \quad (16)$$

qui permet d'exprimer un vecteur  $P^{(\alpha)}$  en fonction des  $n - 1$  autres. En sommant dans (15) sur les  $n - 1$  vecteurs  $P^{(\alpha)}$  différents de  $P^{(\beta)}$  ou sur les  $n - 1$  vecteurs  $P^{(\beta)}$  différents de  $P^{(\alpha)}$ , nous obtenons les conditions nécessaires mais non suffisantes suivantes: pour tout état pur  $P$ , on doit avoir

$$P \cdot \hat{M}P \leq -P \cdot N \quad (17.1)$$

$$P \cdot \hat{M}P \leq (n - 1)P \cdot N \quad (17.2)$$

Elles sont valables pour tout état pur  $P$  puisqu'un tel état est toujours inclus dans au moins une sous-algèbre de Cartan et peut donc être considéré comme un  $P^{(\alpha)}$ . Il convient de remarquer que ces conditions ne mettent pas en jeu la partie antisymétrique de la matrice  $\hat{M}$ .

Une autre conséquence de ce critère découle de la remarque suivante. D'après la formule A-2 de l'appendice A, deux états purs  $P^{(\alpha)}$  et  $P^{(\beta)}$  situés dans un même  $\bar{E}_{n-1}^c$  vérifient la relation

$$\forall K, \quad \sum_{I,J=1}^r P_I^{(\alpha)} C_{IKJ} P_J^{(\beta)} = 0 \quad (18)$$

ou, sous forme vectorielle

$$\forall K, \quad \mathbf{P}^{(\alpha)} \hat{\Gamma}_K \mathbf{P}^{(\beta)} = 0 \quad (18')$$

Si un couple  $\hat{M}, N$  vérifie la condition (15), on peut ajouter à  $\hat{M}$  la matrice

$$\hat{\Omega} = \sum_{K=1}^r h_K \hat{\Gamma}_K \quad (19)$$

Quel que soit le vecteur  $\mathbf{h}$  de composantes  $h_K$ , le couple

$$\begin{cases} \hat{M}' = \hat{M} + \hat{\Omega} \\ N \end{cases} \quad (20)$$

vérifie encore la condition (15). Nous avons vu, dans le paragraphe II, qu'une matrice  $\hat{\Omega}$  de la forme (19) correspond à une évolution hamiltonienne. L'existence de la transformation (20) va permettre de définir de manière unique ce qu'on peut appeler la partie hamiltonienne de  $\hat{M}$ . Dans le paragraphe suivant, nous exprimons la matrice  $\hat{M}$  comme une somme de plusieurs termes, notamment pour isoler cette partie hamiltonienne.

#### IV. Décomposition Canonique de la Loi d'Evolution

Nous allons dans ce paragraphe opérer une séparation canonique de la loi d'évolution (5) en plusieurs parties.

Il est toujours possible, pour  $n > 2$ , de poser (trace calculée sur  $\bar{E}_r$ )

$$h_j = -\frac{1}{2n} \text{tr}(\hat{M} \hat{\Gamma}_j) \quad a_j = \frac{n}{2(n^2 - 4)} \text{tr}(\hat{M} \hat{\Delta}_j) \quad (21)$$

et d'introduire les matrices suivantes, définies de manière unique pour  $\hat{M}$  donnée:

$$\hat{\Omega} = \sum_j h_j \hat{\Gamma}_j = \mathbf{h} \cdot \hat{\Gamma}; \quad \hat{T} = \sum_j a_j \hat{\Delta}_j = \mathbf{a} \cdot \hat{\Delta} \quad (22)$$

*Remarque:* Pour  $n = 2$ , les matrices  $\hat{\Delta}_j$  sont nulles et la matrice  $\hat{T}$  également; pour  $n > 2$ , la construction est faite sans difficulté.

La matrice  $\hat{M}$  admet alors la décomposition unique

$$\hat{M} = \hat{M}_1 + \hat{\Omega} + \hat{T}$$

Si on ajoute à une matrice  $\hat{M}$  donnée un terme

$$\sum_l (\alpha_l \hat{\Gamma}_l + \beta_l \hat{\Delta}_l), \quad (\alpha_l, \beta_l \in \mathbb{R})$$

on obtient une nouvelle matrice  $\hat{M}'$  à laquelle on peut appliquer la décomposition précédente, ce qui nous donne:

$$\hat{\Omega}' = \hat{\Omega} + \sum_l \alpha_l \hat{\Gamma}_l$$

$$\hat{T}' = \hat{T} + \sum_I \beta_I \hat{\Delta}_I$$

$$\hat{M}'_1 = \hat{M}_1$$

On voit que les termes supplémentaires en  $\hat{\Gamma}_I$  sont tous inclus dans  $\hat{\Omega}$ , ceux en  $\hat{\Delta}_I$  dans  $\hat{T}$ , alors que la matrice  $\hat{M}_1$  n'est pas modifiée. On peut, de plus, séparer de manière unique  $\hat{M}_1$  en une partie symétrique et une partie antisymétrique, d'où

$$\hat{M} = \hat{S} + \hat{A} + \hat{\Omega} + \hat{T} \quad (23)$$

$\hat{S}$  est la partie symétrique de  $\hat{M}_1$

$\hat{A}$  la partie antisymétrique de  $\hat{M}_1$

$\hat{\Omega}$  la partie que l'on appellera hamiltonienne

$\hat{T}$  une matrice symétrique construite à l'aide des  $\hat{\Delta}_I$

Nous savons déjà que  $\hat{\Omega}$  est sans influence sur le caractère positif ou non de l'évolution. Nous le retranchons donc de  $\hat{M}$  dans la relation (15) qui devient:

$$\mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \hat{S}\mathbf{P}^{(\beta)} + \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \hat{A}\mathbf{P}^{(\beta)} + \sum_I a_I \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \hat{\Delta}_I \mathbf{P}^{(\beta)} + \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{N} \geq 0$$

De l'orthogonalité de  $\mathbf{P}^{(\alpha)}$  et  $\mathbf{P}^{(\beta)}$  et de la relation (A-4), découle que

$$\mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \hat{\Delta}_K \mathbf{P}^{(\beta)} = -2(P_K^{(\alpha)} + P_K^{(\beta)})$$

ce qui donne

$$\mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \hat{S}\mathbf{P}^{(\beta)} + \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \hat{A}\mathbf{P}^{(\beta)} + \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{N} - 2(\mathbf{P}^{(\alpha)} + \mathbf{P}^{(\beta)}) \cdot \mathbf{a} \geq 0 \quad (24)$$

### V. Exemples

1) Une des plus simples équations pilotes est la suivante [16]

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{\hat{\rho} - \hat{\rho}_0}{\tau} \quad (25)$$

où  $\hat{H}$  est un hamiltonien,  $\tau$  un temps de relaxation et  $\hat{\rho}_0$  un opérateur. La séparation canonique du paragraphe précédent conduit alors à

$$\hat{\Omega} = -\frac{1}{\hbar} \sum_K h_K \hat{\Gamma}_K \quad \text{avec} \quad h_K = \text{tr}(\hat{H} \hat{Q}_K)$$

$$\hat{A} = \hat{T} = 0$$

$$\hat{S} = -\frac{1}{\tau} \hat{T}$$

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}_0}{\tau}$$

et la condition (24) d'évolution positive devient

$$\mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \left( -\frac{\hat{I}}{\tau} \right) \mathbf{P}^{(\beta)} + \frac{\mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{P}_0}{\tau} \geq 0$$

Puisque  $\mathbf{P}^{(\alpha)}$  et  $\mathbf{P}^{(\beta)}$  sont des états orthogonaux, on a:

$$\mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{P}^{(\beta)} = -n$$

d'où la nouvelle forme de la condition

$$n + \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} \geq 0$$

pour tout état pur  $\mathbf{P}^{(\alpha)}$ . C'est aussi la condition pour que  $\hat{\rho}_0$  représente un état du système. L'équation (25) définit donc une évolution positive si et seulement si  $\hat{\rho}_0$  est un opérateur-densité.

2) Dans le formalisme des superopérateurs, l'équation linéaire d'évolution que nous étudions prend la forme de l'équation de Redfield [15]

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{R} \cdot \hat{\rho} \quad (26)$$

Cette équation peut être facilement ramenée à l'équation (5). Pour obtenir  $\hat{M}$  et  $N$ , on reporte dans (26) l'expression (1) de l'opérateur-densité et on obtient (trace sur  $H_n$ )

$$M_{KJ} = \text{tr}(\hat{Q}_K \hat{R} \hat{Q}_J)$$

$$N_K = \text{tr}(\hat{Q}_K \hat{R} \hat{I})$$

ou à l'aide des composantes dans une base  $\{|v_j\rangle\}$  de  $H_n$ ,

$$M_{KJ} = \sum_{i,j,k,l} (\hat{Q}_K)_{ji} R_{ij,kl} (\hat{Q}_J)_{kl} \quad (27-1)$$

$$N_K = \sum_{i,j,l} (\hat{Q}_K)_{ji} R_{ij,ll} \quad (27-2)$$

Il convient de remarquer que le superopérateur  $\hat{R}$  doit être soumis à différentes restrictions pour pouvoir conserver la trace et l'hermiticité de  $\hat{\rho}$ . Ces restrictions sont exprimées sous la forme:

$$R_{ij,kl} = \overline{R_{ji,ik}}; \quad \sum_l R_{ll,ik} = 0 \quad (28)$$

la première assure le caractère réel de  $\hat{M}$  et  $N$ .  $\hat{R}$  peut, comme tout opérateur, être décomposé en une partie hermitique et une autre anti-hermitique, soit ici, compte-tenu de la première condition (28)

$$H_{ij,kl}^+ = \frac{1}{2}(R_{ij,kl} + R_{lk,ji}) \quad (29-1)$$

$$H_{ij,kl}^- = \frac{1}{2}(R_{ij,kl} - R_{lk,ji}) \quad (29-2)$$

$\hat{H}$  conduit à la partie symétrique de  $\hat{M}$ ,  $\hat{H}^-$  à la partie antisymétrique de  $\hat{M}$ . En tenant compte de la deuxième condition (28), on constate par ailleurs que chacun des deux

superopérateurs donne la moitié du vecteur  $N$  initial, d'où

$$N = N^+ + N^- \quad \text{avec} \quad N^+ = N^- \quad (30)$$

Jeener [14] interprète ces deux parties comme un terme de relaxation pour la partie symétrique et un déplacement de fréquence pour la partie antisymétrique. Il faut toutefois noter que chacune de ces parties peut encore être séparée en termes de nature différente puisqu'il a été possible d'en obtenir une décomposition canonique. En particulier, dans la partie antisymétrique (anti-hermitique pour le superopérateur), une partie peut éventuellement être regroupée avec le hamiltonien  $\hat{H}$  pour donner un hamiltonien effectif tandis que le terme  $\hat{A}$  du paragraphe précédent, même s'il est antisymétrique, ne peut jamais donner un hamiltonien; le terme  $N^-$  qui l'accompagne montre qu'il ne conserve même pas nécessairement le module du vecteur de cohérence.

### Appendice A

En explicitant le produit des opérateurs-densités, on peut obtenir des relations pour les vecteurs de cohérence de certains cas particuliers importants.

Soit  $P$  et  $P'$  les vecteurs de cohérence de deux états et  $\{\hat{Q}_I\}_{I=1, \dots, r}$  une  $F$ -base. Nous avons introduit dans [8] les notations suivantes

$$i[\hat{Q}_I, \hat{Q}_J] = \sum_{K=1}^r C_{IK} \hat{Q}_K$$

$$[\hat{Q}_I, \hat{Q}_J]_+ = \frac{2}{n} \delta_{IJ} \hat{I} + \sum_{K=1}^r D_{IK} \hat{Q}_K$$

où  $C_{IK}$  est complètement antisymétrique et  $D_{IK}$  complètement symétrique. Le produit des opérateurs-densités correspondant à  $P$  et  $P'$  est alors

$$\frac{1}{n^2} \left( 1 + \frac{P \cdot P'}{n} \right) \hat{I} + \frac{1}{n^2} \sum_{K=1}^r \left\{ P_K + P'_K + \frac{1}{2} \sum_{I,J=1}^r P_I P'_J (D_{IK} - iC_{IK}) \right\} \hat{Q}_K \quad (A-1)$$

Pour que les vecteurs  $P$  et  $P'$  soient dans un même sous-espace  $\overline{E_{n-1}^c}$ , il faut que les opérateurs-densités correspondants commutent. L'expression précédente contient un seul terme non symétrique, donc  $P$  et  $P'$  appartiennent à un même  $\overline{E_{n-1}^c}$  si et seulement si

$$\forall K, \quad \sum_{I,J} P_I P'_J C_{IK} = 0 \quad (A-2)$$

Un état pur est caractérisé par la condition  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ . On a donc une nouvelle définition:  $P$  représente un état pur si et seulement si

$$P^2 = n(n-1) \quad (A-3)$$

$$\sum_{I,J} P_I P'_J D_{IK} = 2(n-2)P_K$$

Il est utile parfois de considérer des états orthogonaux définis par la relation

$$\hat{\rho} \cdot \hat{\rho}' = 0$$

qui généralise la notion d'états purs orthogonaux. Les vecteurs de cohérence correspondants doivent alors obéir aux relations

$$P \cdot P' = -n$$

$$\sum_{I,J=1}^r P_I P'_J C_{IJK} = 0, \quad \forall K \quad (\text{A-4})$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{I,J=1}^r P_I P'_J D_{IJK} = P_K + P'_K, \quad \forall K$$

Deux états purs d'un même  $\bar{E}_{n-1}^c$ , comme ceux figurant dans le critère d'évolution positive, satisfont donc aux relations (A-3) et (A-4).

### Appendice B

Nous jugeons utile de réunir ici un certain nombre de résultats purement algébriques dont plusieurs ont déjà été utilisés dans des articles précédents.

Ainsi, dans [8] nous avons introduit, en plus de matrices  $\hat{\Gamma}_K$  de la représentation adjointe, des matrices symétriques  $\hat{\Delta}_K$ . Nous pourrions en fait écrire:

$$\hat{Q}_I \hat{Q}_J = \frac{\delta_{IJ}}{n} \hat{I} + \frac{1}{2} \sum_K (D_{IJK} - iC_{IJK}) \hat{Q}_K \quad (\text{B-1})$$

puisque toute matrice  $n \times n$  peut être décrite comme combinaison linéaire complexe des matrices  $\hat{I}$  et  $\hat{Q}_K$ .

Le premier terme du second membre est obtenu par la relation d'orthogonalité au sens de Fano:

$$\text{tr}(\hat{Q}_I \hat{Q}_J) = \delta_{IJ} \quad (\text{B-2})$$

La formule (B-1) montre que les  $D_{IJK}$  d'une part et les  $C_{IJK}$  d'autre part, se transforment comme les composantes de deux tenseurs pour toute transformation orthogonale des  $\hat{Q}_J$ . On a introduit dans [8] les  $2r$  matrices sur  $\bar{E}_r$ :

$$(\hat{\Gamma}_J)_{IK} = C_{IJK}; \quad (\hat{\Delta}_J)_{IK} = C_{IJK} \quad (\text{B-3})$$

En utilisant une forme explicite des matrices  $\hat{Q}_J$ , par exemple celle donnée en [4], on obtient après un calcul assez long (Trace sur  $\bar{E}_r$ ).

$$\text{tr}(\hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_K) = -2n \delta_{JK} \quad (\text{B-4-1})$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_K) = \frac{2}{n} (n^2 - 4) \delta_{JK} \quad (\text{B-4-2})$$

Du fait des propriétés tensorielles des  $D_{IJK}$  et  $C_{IJK}$ , ces valeurs se conservent lors d'une transformation orthogonale des matrices  $\hat{Q}_J$ . Les relations (B-4) sont donc vraies pour toute  $F$ -base.

*Remarque.* Dans l'article [5] la formule (24-b) est fautive et doit être remplacée par la formule précédente (B-4-1). La formule (37) du même article doit alors être remplacée par:

$$H_j = \frac{\hbar}{2n} \text{tr}(\hat{\Omega}_j \hat{\Gamma}_j) \quad (\text{B-5})$$

Cette erreur ne modifie pas la suite de l'article [5].  
Les relations (B-4) doivent être complétées par:

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_j \hat{\Gamma}_k) = 0 \quad (\text{B-6})$$

qui proviennent des propriétés de symétrie des deux matrices.

#### Acknowledgment

Je remercie le Professeur J. Tillieu qui m'a conseillé et suivi lors de la réalisation de ce travail.

#### Bibliography

- [1] U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **29** (1), 74 (1957).
- [2] U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **55** (4), 855 (1983).
- [3] V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, *J. Math. Phys.* **17** (5), 821 (1976).
- [4] J. Tillieu and A. van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* **23**, 1807 (1983).
- [5] J. Tillieu and A. van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* **23**, 1817 (1983).
- [6] J. Tillieu and A. van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* **26**, 479 (1984).
- [7] A. van Groenendael, *Int. J. Quantum Chem.* **27**, 417 (1985).
- [8] A. van Groenendael and J. Tillieu, *Int. J. Quantum Chem.* **28**, 269 (1985).
- [9] F. T. Hioe and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **25** (4), 2168 (1982).
- [10] F. T. Hioe, *Phys. Lett.* **99A** (4), 150 (1983).
- [11] H. Spohn, *Rev. Mod. Phys.* **52** (3), 569 (1980).
- [12] E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems* (Academic Press, London, 1976).
- [13] V. Gorini, A. Frigerio, M. Verri, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, *Rep. Math. Phys.* **13**, 149 (1978).
- [14] J. Jeener, *Adv. Mag. Reson.* **10**, 1 (1982).
- [15] A. G. Redfield, *Adv. Mag. Reson.* **1**, 1 (1965).
- [16] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (Plenum Press, New York, 1981).

Received August 6, 1985

Accepted for publication December 2, 1985

## VI - CONCLUSION

Lors de l'introduction de la mécanique quantique, les fonctions d'ondes ont souvent été considérées plus ou moins explicitement comme décrivant des systèmes classiques incomplètement connus. Une expression comme "incertitudes de Heisenberg" provient de ce point de vue. Actuellement, on ne considère plus que la position de l'électron dans l'état  $1s$  de l'atome d'hydrogène est inconnue ; on considère plutôt que la question n'a pas de sens pour cet état, état qui est néanmoins complètement défini. Une situation analogue est rencontrée avec les opérateurs-densités. Ceux-ci ont été utilisés pour décrire des moyennes statistiques, ce qui a souvent donné l'impression d'un artifice destiné à traiter des systèmes quantiques dont on ne connaît pas bien l'état. L'exemple donné par D. Bohm [BOHM], cité dans l'introduction, montre que si l'on veut pouvoir décrire l'état d'un système isolé, le formalisme des vecteurs d'états est insuffisant. On peut désormais dire que l'état d'un système est un opérateur-densité. Certains états très particuliers, les états purs, correspondent à des vecteurs d'état. Dans le formalisme des vecteurs d'état, pour n'importe quel de ces vecteurs, il existe des opérateurs hermitiques pour lesquels les mesures ont un écart quadratique moyen nul. Ces opérateurs représentent les grandeurs physiques définies dans cet état. Dans le formalisme des opérateurs-densités, de tels opérateurs n'existent plus que dans des cas particuliers. Un état fait correspondre à tout opérateur hermitique sa valeur moyenne.

Le formalisme introduit par Fano [FANO, 57] décrit les opérateurs d'un système à  $n$  niveaux, par les vecteurs d'un espace vectoriel

de dimension  $n^2$  sur  $C$ . Les opérateurs hermitiques sont alors décrits par des vecteurs dans un espace réel de dimension  $n^2$ .

Si deux opérateurs hermitiques diffèrent uniquement par leur trace, alors, quel que soit l'état pour lequel les mesures associées à ces opérateurs sont effectuées, la différence entre les valeurs moyennes est constante. Il suffit donc de considérer les opérateurs hermitiques de trace nulle. De même, tous les opérateurs-densités ont une trace égale à 1. Un opérateur-densité est donc complètement caractérisé par sa partie de trace nulle. Ces remarques nous ont conduit à représenter ces opérateurs dans un espace  $\bar{E}_r$  réel de dimension  $n^2-1$ . Le commutateur entre opérateurs munit  $\bar{E}_r$  de la structure d'algèbre de Lie de  $su(n)$ .

Outre la précision donnée aux concepts utilisés par les physiciens, l'usage d'une structure mathématique telle que celle d'algèbre de Lie fournit tout un lot de notions nouvelles et de théorèmes dont l'"importation" en physique peut faire naître des idées nouvelles et permettre de surmonter des difficultés. Au cours de cette étude, nous avons pu ainsi remarquer l'importance prise par les sous-algèbres de Cartan qui, dans ce formalisme, ont un rôle analogue à celui des bases orthonormées dans l'espace des états purs. Choisir la sous-algèbre de Cartan contenant un vecteur de  $\bar{E}_r$  conduit à des simplifications analogues à celles que l'on obtient en choisissant une base propre pour diagonaliser un opérateur hermitique. Ce point particulier important ne fait que confirmer l'intérêt qu'il y a à utiliser, en physique, des structures mathématiques aussi précisément définies que possible. Ce point de méthode est bien souligné par Dirac lorsqu'il plaide pour :

*"la nécessité d'une base mathématique saine pour toute théorie physique fondamentale"\*.*

Initialement, Einstein se méfiait davantage des mathématiques. Il confiait néanmoins à A. Sommerfeld, dans une lettre du 29 Octobre 1912 [EIS,86]

---

\* I want to emphasize the necessity for a sound mathematical basis for any fundamental physical theory [DIR]

"... et je suis désormais pénétré d'un grand respect pour les mathématiques dont j'avais alors dans ma simplicité d'esprit considéré la partie la plus subtile comme un luxe pur ..."

Dans cette thèse, nous avons également insisté sur un second point : les propriétés de l'opérateur-densité. Tout opérateur hermitique, de trace 1 et semi-défini positif peut être interprété comme un opérateur-densité. Ces trois propriétés sont fondamentales. Les deux premières sont simples à vérifier dans la plupart des formalismes et immédiats dans celui que nous utilisons, puisqu'à tout vecteur de  $\mathcal{E}_r$  est associé un et un seul opérateur hermitique de trace 1. Il est plus difficile de vérifier si un opérateur est semi-défini positif, et surtout de vérifier si toutes les solutions d'un problème donné possèdent cette propriété. L'ensemble  $\bar{D}$  des vecteurs de  $\mathcal{E}_r$  donnant des opérateurs densités a été étudié aussi complètement qu'il nous a été possible de le faire. Nous avons obtenu des équations qui permettent de déterminer si un vecteur donné de  $\mathcal{E}_r$  représente ou non un opérateur-densité.

Un problème a été particulièrement développé à cause de son importance : celui de l'évolution d'un système. Dans le cas où l'évolution est hamiltonienne, il a été facile de montrer que si le vecteur de cohérence initial est dans  $\bar{D}$ , il y reste nécessairement au cours du temps. Nous avons, pour ces systèmes, défini une famille de constantes du mouvement non-linéaires par rapport à l'opérateur-densité, généralisant celles introduites par Hioe et Eberly. Ces états incomplètement définis sont étudiés, pour une évolution hamiltonienne, au moyen de la notion d'états équivalents de Jauch. Ces états équivalents généralisent la notion de sous-système en interaction avec un système plus grand. Pour que cette notion d'équivalence soit vraiment intéressante, il est nécessaire que deux états dits équivalents donnent le même résultat quel que soit l'instant où une mesure de certains opérateurs est effectuée. Faute de quoi, il deviendrait possible de distinguer ces deux états. Nous avons pu obtenir les relations entre les vecteurs de cohérence, dans  $\mathcal{E}_r$ , des états équivalents et le vecteur représentant le hamiltonien dans ce même espace.

Dans le cas où l'évolution est non-hamiltonienne, il est possible d'écrire des équations ne conservant pas le domaine  $\bar{D}$ . Un état initial pourrait évoluer de telle façon qu'au bout d'un certain temps, le vecteur de cohérence sorte de  $\bar{D}$  et par conséquent ne représente plus un état. Ceci peut être obtenu même par des équations linéaires. Si l'on considère que de telles évolutions ne sont pas physiquement réalistes, on obtient de fortes restrictions aux équations du mouvement possibles. Les inégalités qui expriment ces restrictions ont été explicitées. Une application a été faite au cas des équations de Bloch. Nous trouvons alors que certains ensembles de temps de relaxation ne sont pas possibles.

Le formalisme des vecteurs de cohérence a été introduit à l'origine par Fano en généralisant ce qui était connu pour les systèmes à 2 niveaux. Il faut cependant se méfier des analogies avec ce cas trop simple. Par exemple, pour un système à 2 niveaux, le domaine  $\bar{D}$  est une sphère. Pour qu'une équation d'évolution linéaire soit acceptable, il suffit (et il faut) qu'en aucun cas le module du vecteur de cohérence ne puisse augmenter. Cette condition assez simple n'est absolument plus suffisante pour un système ayant davantage de niveaux.

La complexité des équations et inéquations à manipuler semble a priori nécessiter l'usage d'ordinateurs. La dimension de l'espace  $\mathcal{E}_r$  croît en  $n^2$ , par conséquent, le nombre de composantes des quantités à trois indices  $C_{IJK}$  et  $D_{IJK}$  qui interviennent constamment, croît en  $n^6$ . Tout progrès dans l'expression formelle d'un problème peut diminuer les temps de calcul et surtout peut rendre accessible au calcul des problèmes qui ne l'étaient pas auparavant. Dans ce but, nous avons utilisé des F-bases définies quel que soit le nombre de niveaux. Les tenseurs  $C_{IJK}$  et  $D_{IJK}$  ont été calculés explicitement pour ces F-bases. Nous avons également établi un certain nombre de relations utiles dans les calculs où interviennent des produits contractés entre ces tenseurs.

La méthode décrite ici concerne un grand nombre de domaines. Pratiquement tous ceux pour lesquels le système physique étudié peut être approché par un système ayant un petit nombre de niveaux, et pour

lesquels les notions de mélanges statistiques jouent un rôle important. En résonance magnétique, les systèmes les plus utilisés sont à 2 niveaux, bien que des systèmes complexes puissent être utilisés. L'information cherchée concerne alors l'influence du faible couplage avec des systèmes extérieurs. En spectroscopie, les lasers sont utilisés pour l'étude de systèmes à 3 ou 4 niveaux ayant une interaction importante avec leur environnement. Les systèmes à 2 niveaux ont également un rôle important dans l'étude des verres à basse température ; les interactions de ces systèmes à 2 niveaux avec le reste du verre sont alors leur principale caractéristique. D'une façon générale, les systèmes à  $n$  niveaux peuvent être décrits par des vecteurs de cohérence associés à une algèbre  $su(n)$ . Les caractéristiques physiques du système suggèrent ensuite des approximations limitant le domaine dans lequel sont pris les vecteurs de cohérence, ou des formes particulières pour les équations d'évolution. Ce travail devrait clarifier les relations entre les hypothèses physiques et leurs traductions mathématiques.

De ce point de vue, il serait souhaitable d'obtenir, pour l'appartenance au domaine  $\bar{D}$  des vecteurs de cohérence, un critère plus simple que ceux de l'article IV. Les restrictions aux équations d'évolution, étudiées au chapitre 5 nécessitent également des calculs importants. Les expressions obtenues permettent déjà de traiter certains problèmes et il n'est pas certain que des expressions simples existent. Une autre extension possible consiste à attribuer une signification physique distincte à différents termes de l'équation d'évolution. Dans l'article VI, nous obtenons ainsi une décomposition de la loi d'évolution en plusieurs termes. Cette décomposition ne dépend pas de la base utilisée. L'un de ces termes a une interprétation immédiate, c'est la "partie hamiltonienne". Les trois autres n'ont pas encore reçu d'interprétation physique. Ils contiennent les termes de relaxation ; pour  $n > 2$  ils peuvent cependant décrire des phénomènes plus complexes qu'une simple relaxation vers un état d'équilibre.

## APPENDICE A

---

Les opérateurs  $Q_J$  forment une F-base de l'espace  $\mathcal{E}_r$ . Les trois propriétés qui définissent une F-base sont

$$\hat{Q}_J^+ = \hat{Q}_J \quad (1)$$

$$\text{tr}(\hat{Q}_J) = 0 \quad (2)$$

$$\text{tr}(\hat{Q}_J \hat{Q}_K) = \delta_{JK} \quad (3).$$

La trace du produit définit sur  $\mathcal{E}_r$  un produit scalaire pour lequel les F-bases sont orthonormées ; le passage d'une F-base à une autre est donc une transformation orthogonale de  $\mathcal{E}_r$ . Une propriété valable dans n'importe quelle F-base doit être exprimée par une grandeur tensorielle ou une relation entre grandeurs tensorielles. Dans cet appendice, nous introduisons deux tenseurs particuliers et nous établissons certaines de leurs propriétés. En premier lieu, nous introduisons les tenseurs réels de rang 3  $C_{IJK}$  et  $D_{IJK}$  par les définitions

$$i[\hat{Q}_I, \hat{Q}_J] = \sum_{K=1}^r C_{IJK} \hat{Q}_K \quad (4)$$

$$\{\hat{Q}_I, \hat{Q}_J\} = \frac{2\hat{I}}{n} \delta_{IJ} + \sum_{K=1}^r D_{IJK} \hat{Q}_K \quad (5)$$

ou encore

$$\hat{Q}_I \hat{Q}_J = \frac{\hat{I}}{n} \delta_{IJ} + \sum_{K=1}^r \Omega_{IJK} \hat{Q}_K \quad (6)$$

avec

$$\Omega_{IJK} = \frac{1}{2} (D_{IJK} - iC_{IJK}) \quad (7)$$

De telles grandeurs ont été introduites, pour  $n = 3$ , par [GELL], voir aussi [BA]. Pour  $n = 2$ , les  $D_{IJK}$  sont nuls et  $C_{IJK}$  proportionnels aux composantes  $\epsilon_{IJK}$  du tenseur de Levi-Civita ; dans ce cas particulier, les relations que nous allons obtenir prennent une forme simple et souvent triviale.

Le tenseur complexe  $\Omega_{IJK}$  que nous avons introduit nous intéresse uniquement comme intermédiaire de calcul. En effet,  $\mathcal{E}_r$  et  $\bar{\mathcal{E}}_r$  sont des espaces vectoriels réels, ce sont par conséquent les grandeurs réelles  $C_{IJK}$  et  $D_{IJK}$  qui seront directement utiles. Les grandeurs  $\Omega_{IJK}$  permettent dans certains cas de manipuler en même temps  $D_{IJK}$  et  $C_{IJK}$ .

Les  $C_{IJK}$  et  $D_{IJK}$  se transforment bien comme les composantes de deux tenseurs pour toutes les transformations orthogonales. Il est possible de le constater simplement en effectuant une transformation orthogonale dans l'équation (6), puis en séparant la partie réelle et la partie imaginaire de chaque  $\Omega_{IJK}$ . Les tenseurs obtenus sont des tenseurs sur  $\bar{\mathcal{E}}_r$ .

Les propriétés de symétrie de ces tenseurs s'obtiennent simplement en multipliant les expressions (4) (5) et (6) par  $\hat{Q}_K$  et en prenant la trace. Les expressions obtenues permettent de calculer les composantes des trois tenseurs.

$$C_{IJK} = i \operatorname{tr} ([\hat{Q}_I, \hat{Q}_J] \hat{Q}_K) \quad (8)$$

$$D_{IJK} = \operatorname{tr} (\{\hat{Q}_I, \hat{Q}_J\} \hat{Q}_K) \quad (9)$$

$$\Omega_{IJK} = \operatorname{tr} (\hat{Q}_I \hat{Q}_J \hat{Q}_K) \quad (10)$$

La trace est invariante lors d'une permutation circulaire des opérateurs, on en déduit que  $\Omega_{IJK}$  est invariant par permutation circulaire des indices.  $D_{IJK}$  étant symétrique par rapport aux indices I et J est par conséquent complètement symétrique,  $C_{IJK}$  étant antisymétrique pour ces deux

indices est complètement antisymétrique. La formule (7) et les propriétés de symétrie de  $C_{IJK}$  et  $D_{IJK}$  montrent que la permutation de deux indices donne le complexe conjugué pour le tenseur  $\Omega_{IJK}$ . Il est utile d'introduire les matrices agissant sur un espace vectoriel  $\hat{\mathcal{E}}_r$ , construites à partir des tenseurs précédents.

$$(\hat{\Gamma}_J)_{KL} = C_{KJL} \quad (11-a)$$

$$(\hat{\Delta}_J)_{KL} = D_{KJL} \quad (11-b)$$

$$(\hat{\Omega}_J)_{KL} = \Omega_{KJL} \quad (11-c)$$

Ces matrices ont été utilisées dans l'article VI. Suivant les circonstances, il est plus pratique d'utiliser le jeu de matrices réelles  $\hat{\Gamma}_J$ ,  $\hat{\Delta}_J$  ou les matrices complexes  $\hat{\Omega}_J$ ,  $\hat{\bar{\Omega}}_J$ . La matrice conjuguée  $\hat{\bar{\Omega}}_J$  doit être introduite pour pouvoir reconstruire  $\hat{\Gamma}_J$  et  $\hat{\Delta}_J$  par combinaison linéaire. Les propriétés de symétrie de ces matrices se déduisent de celles des tenseurs  $C_{IJK}$  et  $D_{IJK}$ ,  $\hat{\Gamma}_J$  est antisymétrique,  $\hat{\Delta}_J$  est symétrique,  $\hat{\Omega}_J$  et  $\hat{\bar{\Omega}}_J$  sont hermitiques, de sorte que  $\hat{\bar{\Omega}}_J$  est aussi la transposée de  $\hat{\Omega}_J$ .

Parmi les transformations orthogonales agissant sur l'espace  $\hat{\mathcal{E}}_r$ , un sous-groupe joue un rôle important, celui qui provient des transformations unitaires de  $\mathcal{H}$ . A tout vecteur  $\vec{x} \in \hat{\mathcal{E}}_r$  correspond un opérateur hermitique de trace nulle  $\hat{X}$  agissant sur  $\mathcal{H}$ . Une transformation unitaire  $\hat{U}$  le transforme en un nouvel opérateur hermitique de trace nulle  $\hat{X}' = \hat{U} \hat{X} \hat{U}^+$ , auquel correspond un vecteur  $\vec{x}' \in \hat{\mathcal{E}}_r$ . Nous avons montré dans l'article II que la transformation de  $\vec{x}$  en  $\vec{x}'$  est une transformation orthogonale donnée par

$$\hat{O}_{JK}[\hat{U}] = \text{tr} (\hat{Q}_J \hat{U} \hat{Q}_K \hat{U}^+) \quad (12)$$

Une propriété souvent utile lorsque l'on utilise ces matrices, est

$$\frac{1}{n} \text{tr}(\hat{A})\text{tr}(\hat{B}) + \sum_{J=1}^{n^2-1} \text{tr}(\hat{A}\hat{Q}_J)\text{tr}(\hat{B}\hat{Q}_J) = \text{tr}(\hat{A}\hat{B}) \quad (13)$$

qui est le plus souvent simplifiée par l'utilisation de matrices  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  de trace nulle. Pour démontrer cette relation, nous écrivons  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sous la forme :

$$\hat{A} = \frac{1}{n} (a_0 \hat{I} + \sum_L a_L \hat{Q}_L) \quad \hat{B} = \frac{1}{n} (b_0 \hat{I} + \sum_L b_L \hat{Q}_L)$$

Leur produit peut être écrit sous la forme

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B} &= \frac{1}{n^2} \{ a_0 b_0 \hat{I} + (a_0 b_L + a_L b_0) \hat{Q}_L + a_J b_K \hat{Q}_J \hat{Q}_K \} \\ &= \frac{1}{n^2} \{ (a_0 b_0 + \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{n}) \hat{I} + \sum_L (a_0 b_L + a_L b_0 + a_J b_K \Omega_{JKL}) \hat{Q}_L \} \end{aligned}$$

dont la trace devient

$$\text{tr}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{a_0 b_0}{n} + \frac{1}{n^2} \vec{a} \cdot \vec{b}$$

En tenant compte des relations

$$a_0 = \text{tr}(\hat{A}) \quad a_J = n \text{tr}(\hat{A} \hat{Q}_J)$$

et des relations semblables pour  $\hat{B}$  on obtient la relation (13).

Les transformations  $\hat{O}[\hat{U}]$  ont été définies sur  $\hat{\mathcal{E}}_r$ . Il est également possible de les faire agir sur les matrices  $\hat{Q}_J$  de  $\mathcal{E}_r$  qui correspondent aux vecteurs de base de  $\hat{\mathcal{E}}_r$ . La transformation est alors, comme nous l'avons démontré dans l'article II,

$$\hat{Q}'_K = \hat{U} \hat{Q}_K \hat{U}^+ = \sum_M O_{MK}[\hat{U}] \hat{Q}_M \quad (14)$$

Nous voulons maintenant construire différents invariants pour le groupe orthogonal.

Un premier invariant provient immédiatement de la définition du groupe orthogonal, il s'agit de

$$\sum_{J=1}^{n^2-1} \hat{Q}_J^2,$$

proportionnel à l'invariant de Casimir de  $su(n)$ . Cette quantité que nous allons calculer, est invariante par le groupe orthogonal. Elle est a fortiori invariante par les  $O[U]$ . En utilisant (14), cette invariance est écrite

$$\hat{U} \sum_{J=1}^{n^2-1} \hat{Q}_J^2 \hat{U}^{-1} = \sum_{J=1}^{n^2-1} \hat{Q}_J^2$$

La matrice commute avec toutes les transformations unitaires, elle est donc proportionnelle à l'identité

$$\sum_{J=1}^{n^2-1} \hat{Q}_J^2 = \alpha \hat{I}$$

La trace de chaque  $\hat{Q}_J^2$  vaut 1 et celle de  $\hat{I}$  vaut  $n$  ; on en déduit la valeur de  $\alpha$  et la relation

$$\sum_{J=1}^{n^2-1} \hat{Q}_J^2 = \frac{n^2-1}{n} \hat{I} \quad (15)$$

En développant  $\hat{Q}_J^2$  au moyen de (6), nous obtenons alors une première propriété des tenseurs de  $\mathcal{E}_r$  introduits précédemment

$$\text{tr}(\hat{\Omega}_K) = \sum_J \Omega_{JKJ} = 0 \quad (16-a)$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_K) = \sum_J D_{JKJ} = 0 \quad (16-b)$$

$$\text{tr}(\hat{\Gamma}_K) = \sum_J C_{JKJ} = 0 \quad (16-c)$$

Tous les vecteurs obtenus par contraction sur deux des trois indices de  $C_{IJK}$  ou des  $D_{IJK}$  sont donc nuls. Au moyen de ces tenseurs nous pouvons construire les tenseurs d'ordre deux suivants (\*) :

(\*) Les tenseurs comportant  $\Omega_{IJK}$  s'en déduisent au moyen de (7)

$$\sum_{I,K} C_{IJK} C_{KLI} , \quad \sum_{I,K} C_{IJK} D_{KLI} , \quad \sum_{I,K} D_{IJK} D_{KLI}$$

Ces grandeurs peuvent être écrites de deux façons à partir des matrices  $\hat{\Gamma}_J$  et  $\hat{\Delta}_J$ . Elles valent d'une part :

$$\text{tr}(\hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_L) , \quad \text{tr}(\hat{\Gamma}_J \hat{\Delta}_L) , \quad \text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_L)$$

Ce sont également les composantes JL des matrices

$$\sum_K \hat{\Gamma}_K^2 , \quad \sum_K \hat{\Gamma}_K \hat{\Delta}_K , \quad \sum_K \hat{\Delta}_K^2$$

La seconde expression est nulle comme produit deux fois contracté d'un tenseur symétrique par un tenseur antisymétrique. Pour calculer les deux autres termes, nous déterminons d'abord  $\text{tr}(\hat{\Omega}_J \hat{\Omega}_K)$  et  $\text{tr}(\hat{\Omega}_J \hat{\hat{\Omega}}_K)$ . Une première relation est obtenue en écrivant que la relation (6) donne un produit associatif  $\hat{Q}_I (\hat{Q}_J \hat{Q}_K) = (\hat{Q}_I \hat{Q}_J) \hat{Q}_K$  on obtient la formule

$$\hat{\Omega}_J \hat{\hat{\Omega}}_K = \frac{1}{n} (\delta_{JK} \hat{I} - \hat{E}_{JK}) + \Omega_{JKL} \hat{\Omega}_L \quad (17)$$

dans laquelle on a introduit la matrice  $\hat{E}_{JK}$  dont l'élément JK vaut 1 et les autres 0 (\*). La trace de cette expression donne immédiatement

$$\text{tr}(\hat{\Omega}_J \hat{\hat{\Omega}}_K) = \frac{n^2 - 2}{n} \delta_{JK} \quad (18)$$

La seconde relation nécessite également deux étapes. Nous montrons d'abord que

$$\hat{Q}_J \hat{Q}_M \hat{Q}_J = -\frac{1}{n} \hat{Q}_M \quad (19)$$

Considérons l'espace  $\mathcal{E}_{n^2}$  de toutes les matrices  $n \times n$ . Il est possible d'y prendre comme base les matrices  $\hat{E}$ . La matrice  $\hat{E}$  est construite de façon analogue à la matrice  $\hat{E}_{JK}$  précédente, les indices  $j$  et  $k$  varient de 1 à  $n$  au lieu de 1 à  $n^2 - 1$  pour  $J$  et  $K$ . Pour une matrice quelconque  $\hat{A}$  on obtient :

(\*)  $(\hat{E}_{JK})_{J'K'} = \delta_{JJ'} \delta_{KK'}$

$$\sum_{j,k} \hat{E}_j^+ \hat{A} \hat{E}_k = \text{tr}(\hat{A}) \hat{I}$$

La base des  $\hat{E}$  est orthonormée avec le produit scalaire  $(\hat{A}, \hat{B}) = \text{tr}(\hat{A}^+ \hat{B})$ . La relation ci-dessus est conservée lorsqu'on change de base orthonormée dans  $\mathcal{E}_n$ . Prenons alors comme base orthonormée les  $\hat{Q}_j$  complétés par  $\frac{1}{\sqrt{n}} \hat{I}$ . La relation devient

$$\frac{1}{n} \hat{A} + \sum_{j=1}^{n^2-1} \hat{Q}_j \hat{A} \hat{Q}_j = \text{tr}(\hat{A}) \hat{I} \quad (20)$$

si  $\hat{A}$  est choisie égale à  $\hat{I}$ , on retrouve l'équation (15). L'équation (19) est obtenue en prenant  $\hat{A} = \hat{Q}_M$ . Pour obtenir la relation sur les  $\hat{\Omega}_j \hat{\bar{\Omega}}_k$ , on développe (19) au moyen de (6), d'où

$$\text{tr}(\hat{\Omega}_M \hat{\bar{\Omega}}_K) = -\frac{2}{n} \delta_{MK} \quad (21)$$

En faisant la somme et la différence de (18) et (21), on obtient les relations portant sur les matrices réelles

$$\text{tr}(\hat{\Gamma}_j \hat{\Gamma}_k) = -2n \delta_{jk} \quad (22)$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_j \hat{\Delta}_k) = \frac{2}{n} (n^2 - 4) \delta_{jk} \quad (23)$$

Les produits de trois matrices donnent également des relations remarquables qui permettent certaines simplifications. Pour les obtenir, on multiplie les deux membres de (17) par  $\hat{\Omega}_M$  ou  $\hat{\bar{\Omega}}_M$  et on prend la trace. Les relations (18) et (19) donnent alors

$$\text{tr}(\hat{\Omega}_j \hat{\Omega}_k \hat{\Omega}_M) = \frac{n^2-3}{n} \Omega_{JKM} \quad (24)$$

$$\text{tr}(\hat{\Omega}_j \hat{\Omega}_k \hat{\bar{\Omega}}_M) = -\frac{\bar{\Omega}_{JKM} + 2\Omega_{JKM}}{n} \quad (25)$$

Par conjugaison, ces expressions deviennent

$$\text{tr}(\hat{\bar{\Omega}}_J \hat{\bar{\Omega}}_K \hat{\bar{\Omega}}_M) = \frac{n^2-3}{n} \bar{\Omega}_{JKM} \quad (26)$$

$$\text{tr}(\hat{\Omega}_J \hat{\Omega}_K \hat{\Omega}_M) = - \frac{\Omega_{JKM} + 2\bar{\Omega}_{JKM}}{n} \quad (27)$$

Le passage aux matrices réelles est obtenu par les sommes et différences de ces quatre équations. Le résultat est :

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_K \hat{\Delta}_L) = \frac{n^2-12}{n} D_{JKL} \quad (28-a)$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_K \hat{\Delta}_L) = \frac{n^2-4}{n} C_{JKL} \quad (28-b)$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Gamma}_K \hat{\Gamma}_L) = -n D_{JKL} \quad (28-c)$$

$$\text{tr}(\hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_K \hat{\Gamma}_L) = -n C_{JKL} \quad (28-d)$$

Toute matrice agissant sur  $\mathcal{E}_r$  est une combinaison linéaire des  $\hat{E}_{JK}$ . La relation (17) montre que toute matrice peut alors être mise sous la forme d'une combinaison linéaire de  $\hat{I}$ , des  $\hat{\Omega}_J$  et des  $\hat{\Omega}_J \hat{\Omega}_K$ . Comme on considère surtout des matrices réelles, on les décompose plutôt selon  $\hat{I}$ ,  $\hat{\Delta}_J$ ,  $\hat{\Gamma}_K$ ,  $\hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_K$ ,  $\hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_K$ . En effet, le développement de (17) donne :

$$\hat{E}_{JK} = I \delta_{JK} + \frac{n}{4} D_{JKL} \hat{\Delta}_L - \frac{n}{4} C_{JKL} \hat{\Gamma}_L - \frac{n}{4} \hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_K + \frac{n}{4} \hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_K \quad (29)$$

Le caractère réel de  $\hat{E}_{JK}$  donne de plus la relation

$$D_{JKL} \hat{\Gamma}_L - C_{JKL} \hat{\Delta}_L = \hat{\Delta}_J \hat{\Gamma}_K + \hat{\Gamma}_J \hat{\Delta}_K \quad (30)$$

Il faut toutefois noter que la décomposition d'une matrice de  $\mathcal{E}_r$  selon cet ensemble de matrices n'est pas unique puisqu'il existe des relations linéaires entre elles. Ces relations figurent dans la deuxième colonne du tableau suivant où nous avons placé sur une même ligne des expressions dont nous avons montré plus haut l'équivalence

Tableau récapitulatif

$$\text{tr } \hat{\Gamma}_J = 0$$

$$\text{tr } \hat{\Delta}_J = 0$$

$$\text{tr}(\hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_K) = -2n \delta_{JK}$$

$$\text{tr}(\hat{\Gamma}_J \hat{\Delta}_K) = 0$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_K) = \frac{2}{n}(n^2-4) \delta_{JK}$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_K \hat{\Delta}_L) = \frac{n^2-12}{n} D_{JKL}$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Delta}_K \hat{\Gamma}_L) = \frac{n^2-4}{n} C_{JKL}$$

$$\text{tr}(\hat{\Delta}_J \hat{\Gamma}_K \hat{\Gamma}_L) = -n D_{JKL}$$

$$\text{tr}(\hat{\Gamma}_J \hat{\Gamma}_K \hat{\Gamma}_L) = -n C_{JKL}$$

$$\sum_K \hat{\Gamma}_K^2 = -2n \hat{I}$$

$$\sum_K \hat{\Gamma}_K \hat{\Delta}_K = 0$$

$$\sum_K \hat{\Delta}_K^2 = \frac{2}{n}(n^2-4) \hat{I}$$

$$D_{JRS} \hat{\Delta}_R \hat{\Delta}_S = \frac{n^2-12}{n} \hat{\Delta}_J$$

$$C_{JRS} \hat{\Delta}_R \hat{\Delta}_S = -\frac{n^2-4}{n} \hat{\Gamma}_J$$

$$D_{JRS} \hat{\Gamma}_R \hat{\Gamma}_S = -n \hat{\Delta}_J$$

$$C_{JRS} \hat{\Gamma}_R \hat{\Gamma}_S = n \hat{\Gamma}_J$$



Ce tableau peut être complété par les relations (13) et (20)

$$\frac{1}{n} \operatorname{tr}(\hat{A}) \operatorname{tr}(\hat{B}) + \operatorname{tr}(\hat{A}\hat{Q}_R) \operatorname{tr}(\hat{B}\hat{Q}_R) = \operatorname{tr}(\hat{A}\hat{B})$$

$$\frac{1}{n} \hat{A} + \hat{Q}_J \hat{A} \hat{Q}_J = \operatorname{tr}(\hat{A}) \hat{I}$$

APPENDICE B

---

Dans cet appendice nous allons considérer plus particulièrement les transformations de  $\mathcal{E}_r$  qui proviennent des transformations unitaires de  $\mathcal{H}$ . Une première propriété est l'invariance des tenseurs  $C_{JKL}$  et  $D_{JKL}$  lors de ces transformations. Il suffit pour le constater d'effectuer les transformations unitaires sur les matrices  $\hat{Q}_J$ ,  $\hat{Q}_K$  et  $\hat{Q}_L$  figurant dans les définitions (A-8) et (A-9). Les plus intéressantes propriétés conservées dans  $\mathcal{H}$  par de telles transformations unitaires sont celles d'états purs, d'états orthogonaux ou d'opérateurs semi-définis positifs (opérateurs-densités). Ceci invite à exprimer de telles propriétés par des relations entre les vecteurs de  $\mathcal{E}_r$  et les deux tenseurs invariants  $C_{JKL}$  et  $D_{JKL}$ .

Pour expliciter les relations entre  $\mathcal{E}$  et  $\mathcal{E}_r$ , il est nécessaire de choisir des bases dans ces deux espaces. Plus précisément, à chaque base orthonormée  $\{|j\rangle\}_{j=1,\dots,n}$  de l'espace  $\mathcal{H}$ , nous associons une base  $\{\hat{Q}_j\}_{j=1,\dots,n}$  de  $\mathcal{E}_r$ . Ces bases, que nous nommons bases standard [HIOE, 81] ou [I], sont définies par les trois ensembles d'opérateurs :

$$\hat{Q}_j = \sqrt{\frac{j}{j+1}} \{ |j+1\rangle\langle j+1| - \frac{1}{j} \sum_{k=1}^j |k\rangle\langle k| \} \quad j=1,\dots,n-1 \quad (1-a)$$

$$\hat{Q}_{+jk} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |j\rangle\langle k| + |k\rangle\langle j| \} \quad 1 \leq j < k \leq n \quad (1-b)$$

$$\hat{Q}_{-jk} = \frac{-i}{\sqrt{2}} \{ |j\rangle\langle k| - |k\rangle\langle j| \} \quad 1 \leq j < k \leq n \quad (1-c)$$

Lorsque nous utilisons des indices variant de 1 à r, les opérateurs diagonaux  $\hat{Q}_j$  sont placés en premier, dans l'ordre de leur indice j. Les opérateurs  $\hat{Q}_{+jk}$  viennent ensuite, classés dans l'ordre lexicographique de leurs indices jk. En dernier, nous plaçons les opérateurs  $\hat{Q}_{-jk}$  également dans l'ordre lexicographique de leurs indices jk.

Les propriétés de symétrie des tenseurs  $C_{IJK}$  et  $D_{IJK}$  permettent de ne calculer que les termes dont les indices sont rangés dans un ordre non décroissant et d'en déduire les autres. Par ailleurs, nous avons choisi les opérateurs  $\hat{Q}_j$  de telle sorte que, pour un opérateur donné, tous les éléments dans la base  $\{|j\rangle\}$  sont ou réels ou imaginaires purs. Les seuls opérateurs à termes imaginaires sont les  $\hat{Q}_{-jk}$ . Lors du calcul de  $\Omega_{JKL}$ , il en résulte la règle suivante : s'il y a un nombre pair d'indices -jk, le terme est réel et vaut  $\frac{1}{2} D_{JKL}$  tandis que  $C_{JKL}$  est nul ; s'il y a un nombre impair d'indices -jk,  $\Omega_{JKL}$  est imaginaire pur et vaut  $-\frac{i}{2} C_{JKL}$  tandis que  $D_{JKL}$  est nul. Ces remarques permettent de donner explicitement, pour toutes les valeurs de n, les tenseurs  $C_{JKL}$  et  $D_{JKL}$  associés à une base standard (Table B). Une bibliothèque de sous-programmes Fortran a été constituée, permettant de disposer des opérateurs  $\hat{Q}_j$ , des tenseurs  $\Omega_{JKL}$ ,  $C_{JKL}$  et  $D_{JKL}$  et de pouvoir passer des indices J aux indices j, +kl, -kl. La première utilisation a été de vérifier, dans le cas n = 3, les formules de l'appendice A.

Nous utilisons maintenant ces tenseurs de  $\vec{\mathcal{E}}_r$  pour traduire les propriétés des opérateurs. Les relations que nous obtenons ont été démontrées de manière dispersée dans les différents articles. Nous les rassemblons ici.

Rappelons que tout opérateur  $\hat{A}$  agissant sur  $\mathcal{H}$  peut être écrit

$$\hat{A} = \frac{1}{n} (a_0 \hat{I} + \sum_j a_j \hat{Q}_j) \quad (2)$$

ce qui définit  $a_0$ , trace de  $\hat{A}$ , et un vecteur  $\vec{a}$  de  $\vec{\mathcal{E}}_r$  de composantes  $a_j$ . Imposer à  $\hat{A}$  d'être hermitique équivaut à imposer à  $a_0$  et aux  $a_j$  d'être réels. Parmi les opérateurs hermitiques, ceux représentant un hamiltonien ou un opérateur-densité jouent un rôle particulier. Rien n'est

$$D_{jjj} = 2 \frac{j-1}{\sqrt{j(j+1)}} \quad 1 \leq j \leq n-1$$

$$D_{jjk} = -\frac{2}{\sqrt{k(k+1)}} \quad 1 \leq j < k \leq n-1$$

$$D_{j, \pm \ell m, \pm \ell m} = \sqrt{\frac{j}{j+1}} (\alpha_{j\ell} + \alpha_{jm}) \quad \ell \leq j+1$$

$$\ell \leq j+1 \leq m$$

$$C_{j, +\ell m, -\ell m} = -\sqrt{\frac{j}{j+1}} (\alpha_{j\ell} - \alpha_{jm})$$

$$D_{+mk, -\ell m, -\ell k} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$D_{+\ell k, -\ell m, -mk} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$D_{+\ell m, -\ell k, -mk} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \ell < m < k$$

$$C_{+\ell m, +\ell k, -mk} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$C_{+\ell m, +mk, -\ell k} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$C_{+\ell k, +mk, -\ell m} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$C_{-\ell m, -\ell k, -mk} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$\alpha_{j\ell} = \begin{cases} -\frac{1}{j} & \ell \leq j \\ 1 & \ell = j+1 \\ 0 & \ell > j+1 \end{cases}$$

TABLE B

Les termes qui ne figurent pas dans cette table sont tous nuls, par exemple  $D_{jjk} = 0$  si  $k < j$ .

changé au système si la trace du hamiltonien change. Nous la prendrons systématiquement égale à zéro. La trace d'un opérateur-densité est toujours 1. Il est donc possible d'introduire dans  $\vec{\mathcal{E}}_r$  les vecteurs  $\vec{h}$  et  $\vec{p}$  avec

$$\hat{H} = \frac{1}{n} \sum_J h_J \hat{Q}_J \quad (3)$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} (\hat{I} + \sum_J p_J \hat{Q}_J) \quad (4)$$

Le produit de deux opérateurs est obtenu au moyen de (A-6) sous la forme :

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{n^2} (a_0 b_0 + \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{n}) \hat{I} + \sum_J (a_0 b_J + b_0 a_J + \vec{b}_0 \hat{\Delta}_J \vec{a}) \hat{Q}_J \quad (5)$$

Les observables compatibles sont représentées par des opérateurs hermitiques qui commutent. Dans  $\vec{\mathcal{E}}_r$ , elles sont représentées par des couples  $(a_0, \vec{a})$  et  $(b_0, \vec{b})$  tels que

$$\forall J \quad \vec{b} \cdot \hat{\Delta}_J \vec{a} = 0 \quad (6)$$

un projecteur  $\hat{A}^2 = \hat{A}$  est tel que

$$\frac{a_0^2}{n} + \frac{a^2}{n^2} = a_0 \quad (7-a)$$

$$\frac{2}{n} a_0 a_J + \frac{1}{2n} \vec{a} \cdot \hat{\Delta}_J \vec{a} = a_J \quad (7-b)$$

Dans le cas d'un opérateur densité,  $\hat{\rho}$  représente un état pur si et seulement si il est hermitique, de trace 1 et tel que  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ . Dans ce cas les valeurs propres sont 0 et 1 et il n'est donc pas nécessaire d'ajouter que  $\rho$  est semi-défini positif. Un état pur est donc défini par un vecteur  $\vec{p}$  de  $\vec{\mathcal{E}}_r$  vérifiant

$$\vec{p}^2 = n(n-1) \quad (8-a)$$

$$\vec{p} \cdot \hat{\Delta}_J \vec{p} = 2(n-2)p_J \quad (8-b)$$

Deux états purs orthogonaux sont deux états purs dont les opérateurs-densités commutent, pour lesquels on a donc, de manière nécessaire et suffisante :

$$\begin{aligned} \vec{p} \cdot \vec{p} &= \vec{p}' \cdot \vec{p}' = n(n-1) \\ \vec{p} \cdot \hat{\Delta}_J \vec{p} &= 2(n-2) P_J \\ \vec{p}' \cdot \hat{\Delta}_J \vec{p}' &= 2(n-2) P'_J \\ \vec{p}' \cdot \hat{\Gamma}_J \vec{p} &= 0 \end{aligned} \tag{9}$$

Cela implique que le produit est nul, ce qui est exprimé par

$$\vec{p} \cdot \vec{p}' = -n \tag{10-a}$$

$$\vec{p} \cdot \hat{\Delta}_J \vec{p}' + 2 P_J + 2 P'_J = 0 \tag{10-b}$$

Dans le cas général, l'opérateur densité est seulement semi-défini positif. Il a été montré dans l'article I que cette condition devient : pour tout état pur  $\vec{p}'$ , c'est-à-dire  $\vec{p}'$  vérifiant (8)

$$\vec{p} \cdot \vec{p}' > -n \tag{11}$$



C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C

INDICES EFFECTUE LE PASSAGE DE LA FORME COURTE DE 1 A NN-1  
A LA FORME DEVELOPPEE

GQI DONNE LES MATRICES QI A PARTIR DES INDICES COURTS

SUBROUTINE INDICE(NDIM,I,J,K,P)

INTEGER NDIM,I,J,K,P  
IF (I .LT. NDIM) THEN

    K=0  
    J=I  
    P=0  
    GO TO 100

END IF  
K=I-NDIM+1  
J=1  
P=1

10 IF (K .LE. (NDIM-J)) GO TO 30  
K=K-NDIM+J

J=J+1  
IF (J .LT. NDIM) GO TO 10  
J=1  
P=2

20 IF (K .LE. (NDIM-J)) GO TO 30  
K=K-NDIM+J

J=J+1  
IF (J .LT. NDIM) GO TO 20  
WRITE(4,\*)'ERREUR J=',J  
GOTO 100

30 K=K+J

100 RETURN

END

C

COMPLEX FUNCTION GQI(DIM,I,L,M)

COMPLEX QJ, PLUSJK, RINJK  
INTEGER DIM,I,L,M,J1,J2,S  
CALL INDICE(DIM,I,J1,J2,S)  
GO TO (100,200,300),S+1

100 IF (L .EQ. M) THEN  
    GQI=QJ(J1,L)

ELSE  
    GQI=CMPLX(0.)

END IF

RETURN

200 GQI=PLUSJK(J1,J2,L,M)

RETURN

300 GQI=RINJK(J1,J2,L,M)

RETURN

END

C  
C  
C  
C  
C  
C

OMEGA DONNE DIRECTEMENT L'ELEMENT DE MATRICE TRACE(OI OJ OK)  
C'EST UNE FONCTION COMPLEXE

ALPHA, OMEGAT NE SONT QUE DES INTERMEDIAIRES DE CALCUL.

REAL FUNCTION ALPHA(I,L)

INTEGER J,L

IF ( J-L+1 ) 10, 20, 30

10 ALPHA = 0.

RETURN

20 ALPHA = 1.

RETURN

30 ALPHA = -1./J

RETURN

END

C

COMPLEX FUNCTION OMEGA(DIM, I,J,K)

INTEGER DIM,I,I1,J,J1,K,K1,L

LOGICAL IMPAIR

COMPLEX OMEGAT

I1 = I

J1 = J

K1 = K

IMPAIR = .FALSE.

IF ( I1 .GT. J1) THEN

L = I1

I1 = J1

J1 = L

IMPAIR = .NOT. IMPAIR

END IF

IF (I1 .GT. K1) THEN

L = I1

I1 = K1

K1 = L

IMPAIR = .NOT. IMPAIR

END IF

IF (J1 .GT. K1) THEN

L = J1

J1 = K1

K1 = L

IMPAIR = .NOT. IMPAIR

END IF

OMEGA = OMEGAT(DIM, I1,J1,K1)

IF (IMPAIR) OMEGA = CONJG(OMEGA)

RETURN

END

COMPLEX FUNCTION OMEGAT(N, I, J, K)

C  
C  
C  
C

CETTE FONCTION UTILISE DES ARGUMENTS I, J, K TRIES

INTEGER N, I, I1, I2, I3, J, J1, J2, J3, K, K1, K2, K3  
REAL DENOM, PREM, SEC, AI, AK

CALL INDICE(N, K, K1, K2, K3)

AI = REAL(I)

AK = REAL(K)

IF (K3 .EQ. 0) THEN

DENOM = 1/SQRT(AK\*AK+AK)

IF (I .EQ. J) THEN

IF (J .EQ. K) THEN

OMEGAT = CMPLX((K-1)\*DENOM)

ELSE

OMEGAT = CMPLX(-DENOM)

END IF

ELSE

OMEGAT = CMPLX(0.)

END IF

ELSE

CALL INDICE(N, I, I1, I2, I3)

CALL INDICE(N, J, J1, J2, J3)

IF (I3 .EQ. 0) THEN

IF ((J1 .EQ. K1) .AND. (J2 .EQ. K2)) THEN

PREM = ALPHA(I, J1)

SEC = ALPHA(I, J2)

IF (J3 .EQ. K3) THEN

OMEGAT = CMPLX(SQRT(AI/(AI+1))\*

1 (PREM+SEC)/2)

ELSE IF ((J3 .EQ. 1) .AND. (K3 .EQ. 2)) THEN

OMEGAT = CMPLX(0., SQRT(AI/(AI+1))\*

1 (PREM-SEC)/2)

ELSE

OMEGAT = CMPLX(0.)

END IF

ELSE

OMEGAT = CMPLX(0.)

END IF

ELSE IF ( I3 \* J3 \* K3 .EQ. 1) THEN

OMEGAT = 0.

IF ((I1 .EQ. J1) .AND. (I2 .EQ. K1) .AND.

1 (J2 .EQ. K2)) OMEGAT = CMPLX(SQRT(.125))

ELSE IF (I3\*J3\*K3 .EQ. 2) THEN

DENOM = SQRT(.125)

IF ((I1 .EQ. J1) .AND. (I2 .EQ. K1) .AND.

1 (J2 .EQ. K2)) THEN

OMEGAT = CMPLX(0., DENOM)

ELSE IF ((I1 .EQ. K1) .AND. (I2 .EQ. J1) .AND.

1 (J2 .EQ. K2)) THEN

OMEGAT = CMPLX(0., DENOM)

ELSE IF ((I1 .EQ. K1) .AND. (I2 .EQ. J2) .AND. (J1 .EQ. K2))

1 THEN

OMEGAT = CMPLX(0., DENOM)

ELSE

OMEGAT = CMPLX(0.)

END IF

```
ELSE IF (I3*J3*K3 .EQ. 4) THEN
  DENOM = SQRT(.125)
  IF ((I1.EQ.J2).AND.(I2.EQ.K2).AND.(J1.EQ.K1)) THEN
    OMEGAT = CMPLX(DENOM)
  ELSE IF ((I1.EQ.J1).AND.(I2.EQ.K2).AND.(J2.EQ.K1))
1 THEN
    OMEGAT = CMPLX(-DENOM)
  ELSE IF ((I1.EQ.J1).AND.(I2.EQ.K1).AND.(J2.EQ.K2))
1 THEN
    OMEGAT = CMPLX(DENOM)
  ELSE
    OMEGAT = CMPLX(0.)
  END IF
ELSE IF (I3*J3*K3 .EQ. 8) THEN
  IF ((I1.EQ.J1).AND.(I2.EQ.K1).AND.(J2.EQ.K2)) THEN
    OMEGAT = CMPLX(0.,SQRT(.125))
  ELSE
    OMEGAT = CMPLX(0.)
  END IF
ELSE
  OMEGAT = CMPLX(0.)
END IF
END IF
RETURN
END
```

C

C

END

C  
C  
C  
C  
C

CE PROGRAMME CALCULE  
LES TRACES DE PRODUIT DE  
3 MATRICES GAMMA

SUBROUTINE SEPRE(DIM,I,J,K,RE,IM)  
COMPLEX Z,TEMP,OMEGA  
REAL RE,IM  
INTEGER DIM,I,J,K  
PARAMETER(Z=(0.,2.))  
TEMP=OMEGA(DIM,I,J,K)  
RE=2\*REAL(TEMP)  
IM=REAL(Z\*TEMP)  
END

C  
C  
C

COMPLEX GRI,OMEGA  
REAL PRECISION,GAMMA,DELTA,SEPRE,DDD,DDG,DGG,GGG,DD,DG,GG  
INTEGER N,I1,I2,I3,K,L,M

C

PRECISION=1.E-5  
READ(8,20)N  
WRITE(7,40)N  
WRITE(7,30)

C

DO 100 I1=1,N\*N-1

C

DO 100 I2=I1,N\*N-1  
DO 100 I3=I2,N\*N-1  
DDG=0.  
DDD=0.  
DGG=0.  
GGG=0  
DO 50 K=1,N\*N-1  
DO 50 L=1,N\*N-1  
DO 50 M=1,N\*N-1

CALL SEPRE(N,K,I1,L,DELTA,GAMMA)  
DD=DELTA  
GG=GAMMA  
CALL SEPRE(N,L,I2,M,DELTA,GAMMA)  
DG=DD\*GAMMA  
DD=DD\*DELTA  
GG=GG\*GAMMA  
CALL SEPRE(N,M,I3,K,DELTA,GAMMA)  
DDD = DDD+DD\*DELTA  
DDG = DDG+DD\*GAMMA  
DGG = DGG+DG\*GAMMA  
GGG = GGG+GG\*GAMMA

50 CONTINUE

CALL SEPRE(N,I1,I2,I3,DELTA,GAMMA)  
WRITE(7,10)I1,I2,I3,DDD,DDG,DGG,GGG,DELTA,GAMMA

100

CONTINUE

10 FORMAT(3I5,3X,6F10.4)

20 FORMAT(I3)

30 FORMAT(4X,'I',4X,'J',4X,'K',8X,'DDD',7X,'DDG',7X,'DGG',  
7X,'GGG',7X,'DELTA',5X,'GAMMA')

40 FORMAT(' TRACE(GAMMA I,GAMMA J,GAMMA K) POUR N=',I4)

END

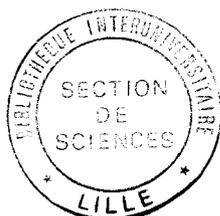
BIBLIOGRAPHIE

- [ARN, 74] V. ARNOLD, "EQUATIONS DIFFERENTIELLES ORDINAIRES"  
(Editions de Moscou, MOSCOU, 1974)
- [BA, 67] H. BACRY, "LECONS SUR LA THEORIE DES GROUPEES ET LES SYMETRIES  
DES PARTICULES ELEMENTAIRES"  
(Gordon & Breach, distr.Dunod, PARIS, 1967)
- [BAL, 70] L.E. BALLENTINE, Rev.Mod.Phys., 42 (1970) 358
- [BAN, 63] C.N. BANWELL, H. PRIMAS, Mol.Phys., 6 (1963) 225
- [BAND, 70] W. BAND, J.L. PARK, Foundations of Physics, 1 (1970) 133
- [BAND, 71] J.L. PARK, W. BAND, Foundations of Physics, 1 (1970) 211
- [BEL, 72] J.G.F. BELINFANTE, B. KOLMAN, "A SURVEY OF LIE GROUPS AND  
LIE ALGEBRAS" p.47  
(Society for Industrial & Applied Mathematics,  
PHILADELPHIA 1972)
- [BELT, 81] E.G. BELTRAMETTI, G. CASSINELLI, "THE LOGIC OF QUANTUM  
MECHANICS"  
(Addison-Wesley, READING, MA, 1981)
- [BLO, 46] F. BLOCH, Phys.Rev. 70 (1946) 460
- [BLO, 52] F. BLOCH, R.K. WANGSNESS, Phys.Rev., 89 (1952) 728
- [BLUM, 81] K. BLUM, "DENSITY MATRIX THEORY AND APPLICATIONS"  
(Plenum, NEW-YORK-LONDON, 1981)
- [BOER, 70] H. BOERNER, "REPRESENTATIONS OF GROUPS" p.89  
(North Holland, AMSTERDAM, 1970)
- [BOHM, 51] D. BOHM, "QUANTUM THEORY" p.611  
(Constable and Co Ltd, LONDON, 1954)

- [CRAW, 58] J.A. CRAWFORD, *Il Nuovo Cimento*, 104 (1958) 698
- [DAV, 76] E.B. DAVIES, "QUANTUM THEORY OF OPEN SYSTEMS"  
(Academic Press, LONDON, 1976)
- [DIR, 78] P.A.M. DIRAC, in "MATHEMATICAL FOUNDATIONS OF QUANTUM THEORY"  
(Ed. A.R. MARLOW, Academic Press, 1978)
- [EIS, 86] A. EINSTEIN, cité par J. EISENSTAEDT, *Arch. for History of  
Exact Sciences*, 35 (1986) 174.
- [ELG, 80] J.N. ELGIN, *Phys.Lett.*, 80A (1980) 140
- [FANO, 57] U. FANO, *Rev. Mod. Phys.*, 291 (1957) 74
- [FANO, 59] U. FANO, G. RACAH, "IRREDUCTIBLE TENSORIAL SETS"  
(Academic Press, NEW-YORK, 1959)
- [FANO, 83] U. FANO, *Rev. Mod. Phys.*, 554 (1983) 855
- [GELL, 64] M. GELL-MANN, in "THE EIGHTFOLD WAY"  
(W.A. BENJAMIN, NEW-YORK, 1964)
- [GOR, 76a] V. GORINI, A. KOSSAKOWSKI, E.C.G. SUDARSHAN, *J.Math.Phys.*  
175 (1976) 821
- [GOR, 76b] V. GORINI, A. KOSSAKOWSKI, *J.Math.Phys.* 17 7 (1976) 1298
- [GOR, 78] V. GORINI, A. FRIGERIO, M. VERRI, A. KOSSAKOWSKI,  
E.C.G. SUDARSHAN  
*Rep on Math.phys.*, 13 2 (1978) 149
- [GR, 80] H.S. GREEN, *Int.J.Quant.Chem.*, Suppl.1, 12 (1977) 197
- [HAA, 73] F. HAAKE, *Springer Tracts in Mod.Phys.*, 66 (1973) 98

- [HIOE, 81] F.T. HIOE, J.H. EBERLY, Phys.Rev.Lett. 47 12 (1981) 838
- [HIOE, 82] F.T. HIOE, J.H. EBERLY, Phys.Rev. 25 A 4 (1982) 2168
- [HIOE, 83] F.T. HIOE, Phys.Lett. 99 A 4 (1983) 150
- [JAC, 62] N. JACOBSON, "LIE ALGEBRAS"  
(Interscience Tracts, Vol.10, Wiley, NEW-YORK, 1962)
- [JAU, 64] J.M. JAUCH, Helv.Phys.Acta 37 (1964) 293
- [JAU, 68] J.M. JAUCH, "FOUNDATIONS OF QUANTUM MECHANICS"  
(Addison-Wesley, READING, Mass., 1968)
- [JEEN, 82] J. JEENER, Adv.Magn.Res., 10 (1982) 1
- [KAEM, 65] F.A. KAEMPFER, "CONCEPTS IN QUANTUM MECHANICS" p.50  
(Academic Press, NEW-YORK, 1965)
- [KRA, 71] K. KRAUS, Ann. of Phys. 64 (1971) 311
- [LICH, 47] A. LICHNEROWICZ, "ALGEBRE ET ANALYSE LINEAIRE" p.96  
(Masson, PARIS, 1947).
- [LICH, 70] D.B. LICHTENBERG, "UNITARY SYMETRY AND ELEMENTARY PARTICLES"  
ch.6  
(Academic Press, NEW-YORK, 1970)
- [LÖW, 77] P.O. LÖWDIN, Int.J.Quant.Chem., Suppl.1, 12 (1977) 197
- [LÖW, 82] P.O. LÖWDIN, Int.J.Quant.Chem., Quant.Chem.Symp. 16 (1982) 485
- [LÖW, 82a] P.O. LÖWDIN, Int.J.Quant.Chem., 21 (1982) 275
- [NEU, 27] J. von NEUMANN, Göttinger Nachrichten (1927) 245

- [NEU, 55] J. von NEUMANN, "MATHEMATICAL FOUNDATIONS OF QUANTUM MECHANICS"  
(Princeton University Press, 1955)
- [PARK, 68] J.L. PARK, H. MARGENAU, Int.J.Th.phys., 1 (1968) 211
- [RED, 65] A.G. REDFIELD, Adv.Magn.res. 1 (1965) 1
- [SCHW, 61] S.S. SCHWEBER, "AN INTRODUCTION TO RELATIVISTIC QUANTUM  
FIELD THEORY" p.330  
(Row, Peterson and Co, AVANSTON, Illinois, 1961)
- [SPO, 80] H. SPOHN, Rev.Mod.Phys. 52 3 (1980) 659



## RESUME

Les matrices hermitiques de trace nulles qui sont associées aux opérateurs-densités d'un système à  $n$  niveaux, forment une représentation de l'algèbre de Lie  $su(n)$ . Dans cette thèse, nous avons cherché à utiliser les propriétés formelles de ces algèbres pour étudier les propriétés des systèmes à  $n$  niveaux.

Nous examinons d'abord les propriétés instantanées, celles qui ne dépendent pas de l'évolution du système : positivité des opérateurs densités, vecteur de cohérence d'un état pur, vecteurs de cohérence d'états orthogonaux. Les résultats obtenus sont alors utilisés pour étudier des systèmes dont l'évolution est définie par un hamiltonien. Nous nous intéressons en particulier aux constantes du mouvement des systèmes composés et aux états équivalents au sens de Jauch.

Par la suite l'étude des systèmes à évolution non-hamiltonienne et des systèmes composés a nécessité de compléter la structure d'algèbre de Lie. Nous obtenons un espace des vecteurs de cohérence dont la structure est définie par un tenseur métrique, par les constantes de structure et par un autre tenseur de rang trois.

Le formalisme ainsi défini a été utilisé pour obtenir des restrictions aux valeurs possibles des composantes du superopérateur de Redfield. Dans le cas des équations de Bloch d'un système à deux niveaux nous obtenons des inégalités qui doivent être vérifiées par les temps de relaxation.

