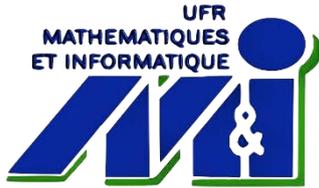




CIMPA

École CIMPA 2025
Centre International de Mathématiques Pures et Appliquées

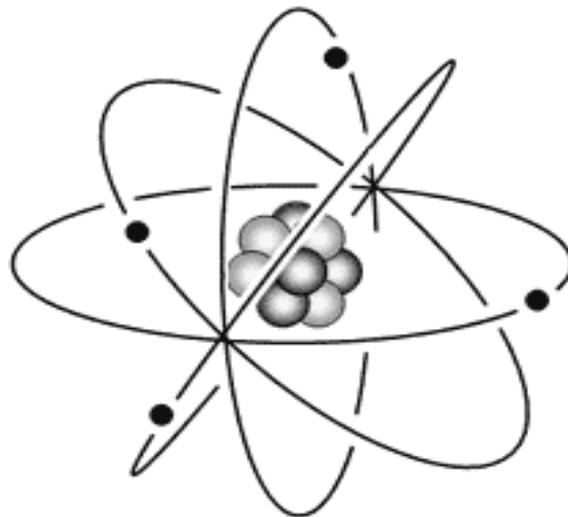
Université Félix Houphouët-Boigny
Abidjan, Côte d'Ivoire 26 mai — 06 juin 2025



Analyse harmonique
Applications à la théorie quantique

Cours introductif

INTRODUCTION AU FORMALISME DE LA THEORIE QUANTIQUE



Emma Georgina ZORO
Maître de Conférences
UFR SSMT / UFHB

SOMMAIRE

I – Origine des concepts quantiques

II – Description quantique d'une particule

II.1. La fonction d'onde

II.2. Propriétés des fonctions d'onde

II.3. Nécessité d'une équation d'onde

II.4. Résolution de l'équation de Schrödinger

III – Outils mathématiques de la MQ

III.1. Espace des fonctions d'onde

III.2. Notation de Dirac

III.3. Opérateurs linéaires

III.4. Postulats

IV – Applications

IV.1. Oscillateur harmonique quantique

IV.2. Symétrie des systèmes quantiques

IV.3. Théorie de la représentation des groupes

IV.4. Produit tensoriel

I – Origine des concepts quantiques

Jusqu'au début du XX^e siècle, les physiciens ne pouvaient expliquer que les phénomènes à l'échelle macroscopique (visible).

La physique classique reconnaît 2 types d'objets :

- la particule : entité discrète de masse m , localisée dans l'espace et décrite à tout instant par sa position x et sa vitesse \vec{v} ;
- l'onde : entité continue, sans masse et non localisées, caractérisée par sa longueur λ (ou sa fréquence ν).

Une crise scientifique majeure naquit suite à des nouveaux résultats expérimentaux obtenus dans les domaines **des très grandes vitesses et de l'infiniment petit**. La résolution de cette crise aboutit à l'élaboration de deux nouvelles théories :

- **la relativité ;**
- **la physique quantique.**

La **physique quantique** est la branche de la Physique qui étudie et décrit le comportement des systèmes à l'**échelle microscopique**. Elle définit la nature particulière des ondes et la nature ondulatoire des particules (dualité onde corpuscule). Par exemple, **la lumière** qui était considérée comme une onde a été définie comme des particules appelées photons, par Einstein.

Dans cette étude et description, la mécanique classique apparaît comme une bonne **approximation** de la mécanique quantique à l'**échelle macroscopique**.

De plus, la MQ introduit la notion de probabilité de présence (le déterminisme n'est plus valable) et de quantification des niveaux d'énergies.

Les expériences qui ont contribué à élaborer les fondements de la MQ sont :

- le rayonnement du corps noir (nature corpusculaire des ondes)
- l'effet photoélectrique (nature corpusculaire des ondes)
- l'effet Compton (nature corpusculaire des ondes)
- l'expérience de Davisson et Germer (nature ondulatoire des corpuscules)
- la stabilité des atomes et aspect des spectres (quantification des énergies)

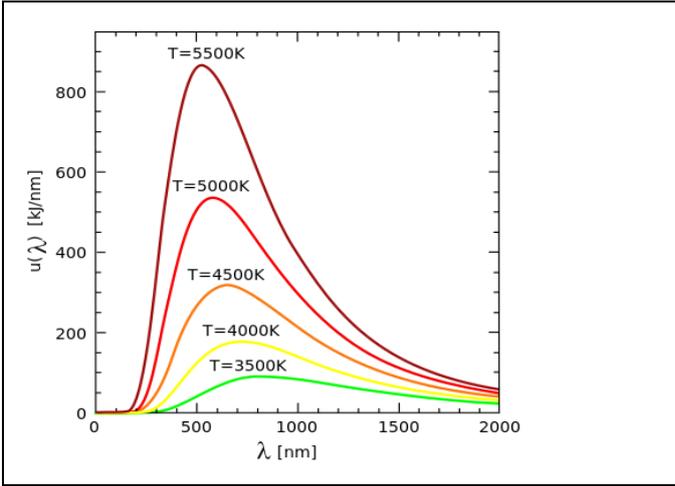


Figure 1
Graphique de l'énergie émise par unité de surface en fonction de λ

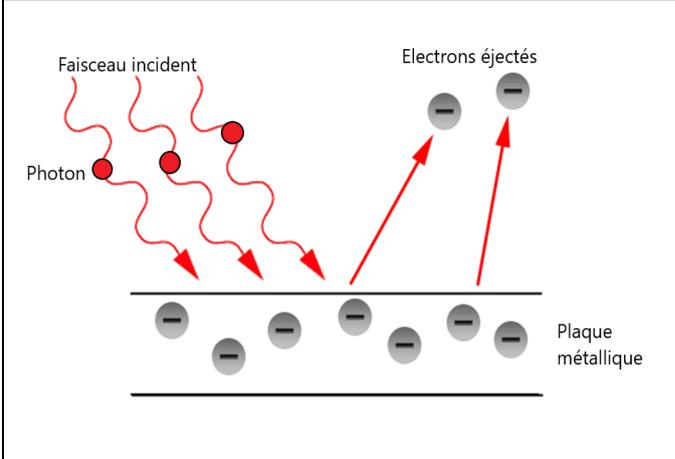


Figure 2
Schématisation de l'effet photoélectrique

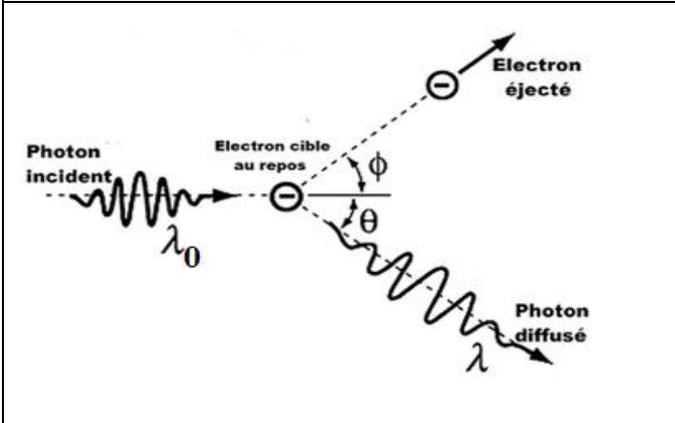


Figure 3
Schématisation de l'effet Compton

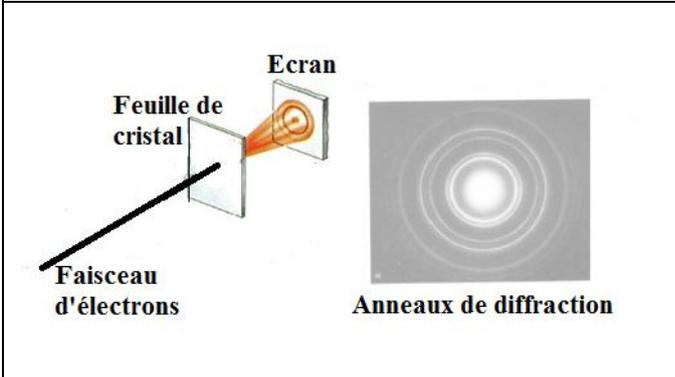


Figure 4
Expérience de Davisson et Germer

II – Description quantique d'une particule

II.1. La fonction d'onde

Le principe de la dualité onde-corpuscule impose que l'état quantique de la particule soit décrit par une grandeur mathématique $\Psi(\vec{r}, t)$ qui concilie ces deux aspects. Cette grandeur mathématique contient toutes les informations possibles sur la particule.

Le caractère aléatoire se traduit à travers la quantité : $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^* \cdot \Psi$ qui représente la **densité de probabilité de présence de la particule**.

La probabilité de présence de la particule à l'instant t dans l'élément de volume $d\tau$ est:

$$\int_{\tau} |\Psi(\tau, t)|^2 d\tau \quad \text{Eq.1}$$

La probabilité de présence de la particule dans tout l'espace D est :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\tau, t)|^2 d\tau = 1 \quad \text{Eq.2}$$

Cette relation est appelée la **Condition de normalisation**.

II.2. Propriétés des fonctions d'onde

La fonction d'onde régissant toutes les propriétés d'un système physique, doit respecter certaines conditions. Ce sont :

1- La probabilité totale de présence dans tout l'espace vaut 1, soit 100%. En effet, la particule se trouve quelque part dans cet espace. Cela correspond à la condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(r, t)|^2 dr = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(r, t) \cdot \Psi(r, t) dr = 1 \quad \text{Eq.3}$$

Cela impose que la fonction d'onde $\Psi(r, t)$ est une fonction de carré sommable.

2- Si Ψ_1 et Ψ_2 sont des solutions de l'équation de Schrödinger, alors toute combinaison linéaire de solutions est aussi une solution : c'est le **principe de superposition**.

$$\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2 \quad \text{Eq.4}$$

3- $\Psi(x)$ est partout définie et continue.

4- $\frac{\partial}{\partial x} \Psi(\mathbf{x})$ est partout finie et continue sauf aux points de discontinuités infinies du potentiel.

5- Les fonctions d'onde forment un espace vectoriel appelé **espace de Hilbert** et noté \mathbb{L}^2 .

II.3. Nécessité d'une équation d'onde

L'équation d'onde régit l'évolution de la fonction d'onde. Il est primordial, connaissant la fonction d'onde d'un système (ou état du système) à un instant t_0 de :

- déterminer cette même fonction à un instant ultérieur t ;
- et de déduire les diverses propriétés dynamiques d'un système à un instant donné.

C'est **Erwin Schrödinger** qui a postulé cette équation qui porte son nom : **équation de Schrödinger**. Les résultats de cette équation coïncident parfaitement avec les données expérimentales.

Dans le cas d'une particule non relativiste de masse m , en mouvement sur l'axe Ox et placée dans un potentiel $V(x,t)$, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi(x, t) \quad \text{Eq.5}$$

Sachant que l'opérateur hamiltonien H vaut : $H = -\left(\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) + V(x, t)$ Eq.6

Alors l'équation de Schrödinger peut s'écrire sous la forme :

$$H \Psi(x, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi(x, t) \quad \text{Eq.7}$$

II.4. Résolution de l'équation de Schrödinger

Trouver les fonctions d'onde des particules telles qu'elles :

- rendent compte de la quantification des énergies à l'échelle atomique;
- permettent de vérifier qu'une particule a un aussi un comportement ondulatoire.

III – Outils mathématiques de la MQ

III.1. Espace des fonctions d'onde

Les fonctions d'onde d'une particule (ou d'un système physique) appartiennent à l'espace vectoriel des fonctions de carrés sommables, c'est-à-dire des fonctions pour lesquelles l'intégrale $\int_D |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau$ converge .

Cet espace vectoriel, noté \mathbb{L}^2 est très vaste.

Étant donné la signification attribuée à $|\psi(\vec{r}, t)|^2$, les seules fonctions d'onde effectivement utilisées possèdent des propriétés de régularité : elles sont partout définies et continues, indéfiniment dérivables et à support borné.

L'ensemble de ces fonctions est un sous-espace de \mathbb{L}^2 , nommé \mathcal{F} .

a) Définition du Produit scalaire

A tout couple de fonctions ψ_1 et ψ_2 de \mathcal{F} , pris dans cet ordre, on associe un nombre complexe noté (ψ_1, ψ_2) appelé produit scalaire de ψ_2 par ψ_1 , et défini par :

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x)^* \psi_2(x) dx \quad \text{Eq.8}$$

b) Propriétés du Produit scalaire

- $(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^*$ condition d'hermiticité
- $(\phi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\phi, \psi_1) + \lambda_2(\phi, \psi_2)$
- $(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2, \phi) = \lambda_1^*(\psi_1, \phi) + \lambda_2^*(\psi_2, \phi)$
- $(\psi, \psi) > 0$
- $(\psi, \psi) = 0$ alors $\psi = 0$
- $(\psi, \psi) = 1$ alors ψ est normée
- $(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1) = 0$ alors $\psi_1 \perp \psi_2$

c) Base orthonormée de \mathcal{F}

Une famille de vecteurs $\{e_i\}$ de \mathcal{F} forme une base orthonormée si :

- Les e_i sont normés et 2 à 2 orthogonaux :

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad \text{Eq.9}$$

- Tout vecteur ψ de \mathcal{F} peut se développer de façon unique sur les e_i : $\psi = \sum_i c_i e_i$ et représenté par une matrice unicolonne.

III.2. Notation de Dirac

a) Vecteur d'état

A toute fonction d'onde de carré sommable, **Dirac** associe un vecteur d'état noté $|\psi\rangle$ et appelé **ket** ψ : $\psi \in \mathcal{F} \Leftrightarrow |\psi\rangle \in \xi$ (ξ : espace des états)

Donc, sur une base de ξ , $|\psi\rangle$ est représenté par une matrice unicolonne : $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$ Eq.10

$\langle\phi|$ est appelé vecteur **bra** ϕ

Il est représenté par une matrice à une ligne et à plusieurs colonnes telle que :

$$\langle\phi| = (b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_n^*) \quad \text{Eq.11}$$

L'ensemble des vecteurs **bra** constitue un espace qu'on note ξ^* et qu'on appelle espace dual de ξ .

b) Correspondance entre ket et bra

A tout **ket** correspond un **bra** et la correspondance est anti-linéaire

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \Rightarrow \langle\psi| = \langle\psi_1| \lambda_1^* + \langle\psi_2| \lambda_2^* \quad \text{Eq.12}$$

Comme $|\lambda\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ alors $\langle\lambda\psi| = \langle\psi|\lambda^*$

Cette correspondance est à la base des propriétés du produit scalaire défini précédemment.

c) Produit scalaire

Le produit scalaire (ϕ, ψ) est noté $\langle\phi|\psi\rangle$ dans ξ .

$$\langle\phi|\psi\rangle = (b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_n^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \sum_i^n b_i^* c_i \quad \text{Eq.13}$$

Le symbole $\langle | \rangle$ s'appelle « **bracket** ».

d) Relation de fermeture

Soient une base $\{|e_i\rangle\}$ et un vecteur $|\psi\rangle$ de ξ . Ce vecteur peut se développer de façon unique suivant les $|e_i\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |e_i\rangle = \sum_i \langle e_i|\psi\rangle |e_i\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|\psi\rangle \quad \text{Eq.14}$$

avec $c_i = \langle e_i|\psi\rangle$ coordonnées du vecteur $|\psi\rangle$ dans la base $\{|e_i\rangle\}$

On en déduit : $\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| = 1$ (Relation de fermeture) Eq.15

III.3. Opérateurs linéaires

A est un opérateur défini sur l'espace vectoriel des états ξ , si à tout vecteur ket $|\psi\rangle$ de ξ , il fait correspondre un autre ket $|\psi'\rangle$ tel que : $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ ou $|\psi'\rangle = |A\psi\rangle$

On dit que A transforme par son action, ket $|\psi\rangle$ en ket $|\psi'\rangle$.

a) Définition

L'opérateur A est dit **linéaire**, si quels que soient deux vecteurs ket $|\psi_1\rangle$ et ket $|\psi_2\rangle$ et deux nombres complexes λ_1 et λ_2 , il vérifie la relation :

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1(A|\psi_1\rangle) + \lambda_2(A|\psi_2\rangle) \quad \text{Eq.16}$$

NB : En MQ, les opérateurs qui nous intéressent sont linéaires.

b) Algèbre des opérateurs

- $A + B = B + A$ (commutativité pour l'addition)
- $A + B + C = A + (B + C) = (A + B) + C$ (associativité)
- $|\psi_1\rangle = A|\psi\rangle$
- $|\psi_2\rangle = B|\psi_1\rangle = B(A|\psi\rangle) = (BA)|\psi\rangle = C|\psi\rangle$

$C = BA$ est le **produit des opérateurs** B et A. En général, $AB \neq BA$. La notion d'ordre est importante dans le produit des opérateurs.

c) Notion de commutateurs

On appelle **commutateur** de A et B, noté $[A, B]$, la relation : $[A, B] = AB - BA$. Eq.17

En général, le produit AB est différent du produit BA. Lorsque $AB - BA = 0$, on dit que A et B commutent. Dans ce cas, le sens physique est la possibilité de **mesure simultanée des grandeurs physiques associées à A et B**.

d) Propriétés des commutateurs

- $[A, B] = -[B, A]$
- $[A, (B + C)] = [A, B] + [A, C]$
- $[A, \alpha B] = [\alpha A, B] = \alpha[A, B]$ α est un scalaire
- $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$
- $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$
- $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$

e) Opérateurs adjoints

Deux opérateurs A et A⁺ sont dits adjoints l'un de l'autre si la relation suivante est vérifiée :

$$\forall |\psi\rangle \text{ et } |\phi\rangle \in \xi, \langle \psi | A^+ | \phi \rangle = (\langle \phi | A | \psi \rangle)^* \quad \text{Eq.18}$$

Dans une base $\{|e_i\rangle\}$, on a :

$$\langle e_i | A^+ | e_j \rangle = (\langle e_j | A | e_i \rangle)^* \Rightarrow A_{ij}^+ = A_{ji}^* \quad \text{Eq.19}$$

La matrice de A⁺ est la *transposée et conjuguée* de A.

A est un **opérateur hermitique s'il est égal à son adjoint** : $A^+ = A \Rightarrow A_{ij}^+ = A_{ji}^* = A_{ij}$

f) Valeurs propres- vecteurs propres

$|\phi_n\rangle$ est dit vecteur propre de l'opérateur A associé à la valeur propre a_n si:

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \quad \text{Eq.20}$$

C'est l'équation aux valeurs propres.

Remarques :

- Les **valeurs propres** d'un opérateur hermitique sont réelles.
- Les **vecteurs propres** d'un opérateur hermitique, associés à des valeurs propres distinctes, sont orthogonaux.

g) Observable

Une observable est un opérateur **linéaire et hermitique** dont les vecteurs propres (orthonormés

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}) \text{ obéissent à la relation de fermeture : } \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = 1$$

Les vecteurs propres d'une observable constituent une base orthonormée. On dit aussi qu'ils forment un **ensemble complet**.

III.4. Postulats

Postulat 1: État quantique d'un système

Un système quantique est complètement décrit par un vecteur $|\psi\rangle$ de norme 1 dans un espace de Hilbert H .

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Ce vecteur est appelé **vecteur d'état** ou fonction d'onde et représente l'état du système.

Postulat 2: Grandeurs physiques

Toute grandeur physique mesurable est représentée par un opérateur hermitique agissant sur l'espace de Hilbert H .

Cet opérateur est une **observable**.

Postulat 3: Mesure d'une observable

Les **résultats possibles** a_i de la mesure d'une grandeur physique sont les **valeurs propres** de l'observable associée \hat{A} .

On peut écrire : $\hat{A}|\psi\rangle = a_i |\psi\rangle$ où $|\psi\rangle$ est le vecteur propre de \hat{A} associé à la valeur propre a_i .

Mentionnons ici que le **Principe d'incertitude de Heisenberg** indique qu'il existe une limite fondamentale sur la précision avec laquelle les paires (P, x) et (E, t) peuvent être mesurées simultanément :

$$\Delta P. \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{Eq.21} \quad \text{et} \quad \Delta E. \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{Eq.22}$$

Postulat 4: Probabilité

Si on mesure une grandeur physique quand le système est dans l'état $|\phi\rangle$, la **probabilité** d'obtenir le résultat a_i correspondant au vecteur propre $|\psi\rangle$ est :

Eq.23 – $P(a_i) = |\langle\psi|\phi\rangle|^2$ si a_i est unique (a_i est non dégénérée)

Eq.24 – $P(a_i) = \sum_{i=1}^n |\langle\psi_i|\phi\rangle|^2$ si les n vecteurs propres $|\psi_i\rangle$ ont la même valeur propre a_i (a_i est dégénérée n fois)

Postulat 5: État du système immédiatement après la mesure

Si la mesure de la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\psi\rangle$ normé, donne le résultat a_i , alors l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée de $|\psi\rangle$ sur le sous-espace propre associé à a_i :

$$|\psi'\rangle = \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}} \quad \text{Eq.25}$$

où P_n est l'opérateur projecteur développé sur le sous-espace propre associé à a_i

NB : si la valeur propre a_i est unique (non dégénérée) alors le système se trouve dans l'état propre associé.

Postulat 6: Évolution temporelle du système

Si un système physique est dans l'état $|\psi(t_0)\rangle$ à un instant initial t_0 . Son évolution temporelle est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad \text{Eq.26}$$

L'état $|\psi(t)\rangle$ est tel que :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} |V_n\rangle \quad \text{Eq.27}$$

E_n = valeur propre de H associée au vecteur propre $|V_n\rangle$;

$c_n(t_0)$ = composantes de $|\psi(t_0)\rangle$ dans la base des vecteurs propres de H

IV – Applications

IV.1. Oscillateur harmonique quantique

En mécanique classique, l'oscillateur harmonique correspond à une masse m liée à un ressort qui est subit une force de rappel proportionnelle à la distance de la masse à la position d'équilibre (loi de Hooke): $\mathbf{F} = -\mathbf{k}\mathbf{x}$

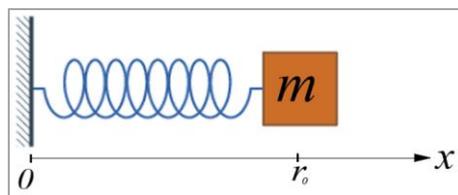


Figure 5 : Oscillateur harmonique classique

a) Description de l'oscillateur harmonique

L'oscillateur harmonique quantique est un système qui subit une force de rappel proportionnelle à son déplacement par rapport à une position d'équilibre. Ce modèle simple sert à décrire les vibrations des molécules.

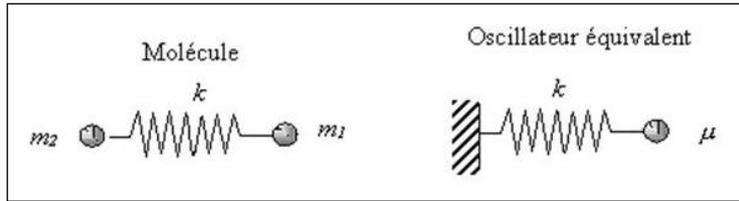


Figure 6 : Modélisation d'une molécule par un oscillateur harmonique

b) Solution de l'équation de Schrödinger

Pour l'oscillateur harmonique quantique, les solutions de l'équation de Schrödinger sont des fonctions propres associées à des **énergies quantifiées** E_n :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{où } n \text{ est un nombre entier} \quad \text{Eq.28}$$

- L'état $n = 0$ correspond à l'état fondamental ou état de plus basse énergie.
- Les états pour $n > 0$ correspondent aux **états excités**.

c) Opérateurs Création et Annihilation

Les opérateurs **Création** (a^+) et **Annihilation** (a) permettent de passer d'un état d'énergie n à un autre niveau n' par action sur les états propres de l'oscillateur harmonique.

Les expressions des opérateurs a^+ et a sont fonction des opérateurs position \hat{X} et impulsion \hat{P} sont :

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{X} + \frac{i}{m\omega} \hat{P} \right) \quad \text{Eq.29}$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{X} - \frac{i}{m\omega} \hat{P} \right) \quad \text{Eq.30}$$

- L'opérateur a **réduit** l'énergie en passant de l'état n à l'état $n-1$ (annihilation d'un quantum d'énergie) : $a|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$ Eq.31

$$E_{n-1} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \hbar\omega = E_n - \hbar\omega \quad \text{Eq.32}$$

- L'opérateur a^+ **augmente** l'énergie en passant de l'état n à l'état $n+1$ (création d'un quantum d'énergie) : $a^+|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle$ Eq.33

$$E_{n+1} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \hbar\omega = E_n + \hbar\omega \quad \text{Eq.34}$$

Connaissant l'état fondamental du système $|\phi_0\rangle$ associé à la valeur $n = 0$, on peut construire

les états excités $|\phi_n\rangle$: $|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^{+n})|\phi_0\rangle$ Eq.35

IV.2. Symétrie des systèmes quantiques

a) Définition de la symétrie

En physique, la **symétrie** correspond à une transformation du système qui laisse certaines de ses propriétés invariables.

Les symétries des systèmes quantiques peuvent être classées en plusieurs catégories :

- symétries spatiales : translation, rotation, inversion
- symétries internes : charges, parité
- symétries de jauge

b) Types de symétrie

Il existe deux types de symétrie :

- **Symétries continues** : où les transformations nécessitent un nombre continu de valeurs (**rotations, translations**)
- **Symétries discrètes** : les transformations n'admettent qu'un nombre fini de possibilités (**réflexion (parité), permutation**).

c) Symétrie et lois de conservation

Selon le théorème de Noether, chaque symétrie continue correspond à une loi de conservation :

- **Symétrie de translation dans le temps** : la loi de conservation de l'énergie.
- **Symétrie de translation dans l'espace** : la loi de conservation de la quantité de mouvement.
- **Symétrie de rotation** : la loi de conservation du moment angulaire.

En MQ, les symétries sont généralement associées à des **opérateurs** unitaires U , qui **commutent avec l'Hamiltonien** (opérateur qui représente l'énergie totale du système) du système.

$$|\Psi\rangle \rightarrow U|\Psi\rangle$$
$$[U, H] = 0$$

Donc :

- il existe une base commune de vecteurs propres de U et H
- la mesure simultanée des opérateurs U et H.

Si un opérateur de symétrie commute avec H, alors la quantité associée à cette symétrie est conservée.

Par exemple, si un système quantique est invariant par **Rotation**, cela signifie que l'opérateur de rotation \widehat{R} commute avec H : $[\widehat{R}, H] = 0$ Cela implique que le **moment angulaire** est une constante dans le temps.

IV.3. Théorie de la représentation des groupes

Les transformations qui décrivent les symétries forment **un groupe**.

La représentation de groupe consiste à faire correspondre des groupes à des **opérateurs linéaires** ou des matrices agissant dans un espace de Hilbert. Elle sert à décrire comment les états quantiques (vecteurs dans un espace de Hilbert) se transforment sous une symétrie.

a) Définition de groupe

Un **groupe** est un ensemble G d'éléments ($g_1, g_2, g_3 \in G$) associés au produit, qui satisfait les quatre propriétés suivantes (fermeture, associativité, élément neutre, élément inverse):

- **Fermeture** : Si g_1 et g_2 sont dans le groupe, alors $g_1 \cdot g_2$ est aussi dans le groupe.
- **Associativité** : $(g_1 \cdot g_2) \cdot g_3 = g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3)$ pour tous les g_1, g_2, g_3 du groupe.
- **Élément neutre** : Il existe un élément neutre **e** dans G, tel que
- $g\mathbf{e} = \mathbf{e}g = g \quad \forall g \in G$
- **Inverse** : $\forall g \in G, \exists g^{-1}$ tel que $g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = \mathbf{e}$

Si $g_1 \cdot g_2 = g_2 \cdot g_1$ alors le groupe est **commutatif** ou **abélien**

b) Types de représentation de groupe

Il y a deux types de représentations des groupes :

- **Représentation irréductible** : elle correspond aux **états fondamentaux** de la physique quantique.
- **Représentation réductible** : elle peut souvent être décomposée en une somme directe de représentations irréductibles.

c) Groupes de LIE

Un **groupe de Lie**, associé à une algèbre de Lie, variété différentielle, est un groupe de transformations continues.

Un groupe de Lie est un ensemble G muni de deux opérations :

- la multiplication : $G \times G \rightarrow G$ qui associe à chaque paire d'éléments (g, h) de G un élément $g \cdot h \in G$
- l'opération d'inverse : $G \rightarrow G$ qui associe à chaque élément $g \in G$ un élément $g^{-1} \in G$

Les groupes de Lie couramment utilisés en MQ sont : **U(1), SU(2), SU(3), SO(3)**.

- **SU(n) — Groupe spécial unitaire de degré n**

Matrices **unitaires** de dimension $n \times n$ qui ont un **déterminant égal à 1**. $U^\dagger U = I$ et $\det(U)=1$ où U^\dagger est la conjuguée transposée de U (l'adjoint de U) et I est la matrice identité de taille n ,

- **SO(n) — Groupe spécial orthogonal de degré n**

Matrices **orthogonales** de dimension $n \times n$ de **déterminant égal à 1**.

Matrices R tq : $R^T R = I$ et $\det(R)=1$ où R^T est la transposée de R ,

- **U(n) — Groupe unitaire de degré n**

Matrices **unitaires** de dimension $n \times n$

Matrices U qui satisfont la condition : $U^\dagger U = I$ (mais $\det(U)$ n'est pas nécessairement égal à 1; c'est un nombre complexe de module 1)

Pour la **Représentation irréductible des groupes de LIE**, il y a :

- Le groupe SU(2) décrit les faibles interactions, il est lié à la représentation des **rotations** dans un espace de **dimension 2** (indexées par un entier ou un demi-entier j , qui représente le **spin** d'une particule de **dimension $2j+1$**).
- Le groupe SO(3) décrit les **rotations** dans l'**espace tridimensionnel**.
- SU(3) décrit les interactions fortes entre les particules élémentaires.
- U(1) est le groupe des **rotations de phase** complexe (invariance de phase globale : $\Psi \rightarrow e^{i\theta}\Psi$ et décrit les symétries de jauge électromagnétique.

SO(3) est le **groupe de symétrie des rotations spatiales** qui agit sur :

- les **vecteurs** (positions, vitesses, champs),
- les **opérateurs de moment cinétique**,
- les **états quantiques** ayant une symétrie sphérique.

Les représentations unitaires irréductibles de SO(3) sont caractérisées par un nombre quantique orbital, $l \in \mathbb{N}$: qui détermine la forme du nuage électronique :

- correspondent aux fonctions sphériques harmoniques $Y_l^m(\theta, \phi)$
- dimension de la représentation : $2l + 1$
- Les états sont notés $|l, m\rangle$ avec $-l \leq m \leq +l$
- états propres de L^2 et L_z (L = moment angulaire orbital)

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

IV.4. Produit tensoriel

En **mécanique quantique**, le **produit tensoriel** \otimes permet de construire l'espace d'état **global** à partir des **espaces d'état individuels** des sous-systèmes.

Si deux systèmes quantiques $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ ont pour espace d'état respectif H_A et H_B ($|\psi\rangle \in H_A$, $|\varphi\rangle \in H_B$), alors le **système composé** a pour espace d'état : $H_{AB} = H_A \otimes H_B$.

Cela signifie que **tous les états du système global** sont des **combinaisons linéaires** d'éléments de la forme : $|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$. Sinon, on parle d'**états intriqués**.

a) Définition du produit tensoriel

Soit ρ_1 et ρ_2 deux représentations du groupe G sur les espaces vectoriels V et W , respectivement ($\rho_1 \in V$, $\rho_2 \in W$ et $g \in G$).

Le **produit tensoriel** de ρ_1 et ρ_2 , noté $\rho_1 \otimes \rho_2$, est une **nouvelle représentation** de G sur le nouvel espace vectoriel $V \otimes W$ donnée par :

$$(\rho_1 \otimes \rho_2)(g)(v \otimes w) = \rho_1(g)v \otimes \rho_2(g)w$$

b) Propriétés du produit tensoriel

Le **produit tensoriel** possède les propriétés suivantes :

- Si ρ_1 et ρ_2 sont des représentations de G , alors $\rho_1 \otimes \rho_2$ est également une représentation de G
- **bilinéaire** : pour $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ et $v_1, v_2 \in V, w_1, w_2 \in W$, on a

$$(\alpha v_1 + \beta v_2) \otimes w_1 = \alpha (v_1 \otimes w_1) + \beta (v_2 \otimes w_1)$$

$$v_1 \otimes (\alpha w_1 + \beta w_2) = \alpha (v_1 \otimes w_1) + \beta (v_1 \otimes w_2)$$

$$(\alpha v_2) \otimes w_2 = v_2 \otimes (\alpha w_2) = \alpha (v_2 \otimes w_2)$$
- **associatif** : soient $w_1, w_2, w_3 \in W$, le produit tensoriel $(w_1 \otimes w_2) \otimes w_3$ est isomorphe au produit tensoriel $w_1 \otimes (w_2 \otimes w_3)$.
- **non commutatif** : $v_1 \otimes w_1 \neq w_1 \otimes v_1$

Exemple: deux spins 1/2

Espace des états

Chaque spin 1/2 est décrit par l'espace \mathbb{C}^2 avec la base canonique : $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Le produit tensoriel $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^4$ a pour base canonique : $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$

Etats propres du spin total

Spin total $S=1$	état triplet
$ T_+\rangle = \uparrow\uparrow\rangle$	$(m = +1)$;
$ T_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	$(m = 0)$;
$ T_-\rangle = \downarrow\downarrow\rangle$	$(m = -1)$
Spin total $S = 0$	état singulet intriqué

Conclusion

L'utilité de la mécanique quantique dans l'analyse harmonique réside dans le fait qu'elle permet :

- de décrire les particules par des ondes de **probabilités** ;
- d'étudier les systèmes quantiques en termes de décomposition en modes de fréquence (**principe de superposition**) ;
- d'explorer la dynamique de ces systèmes à l'aide d'outils tels que les opérateurs de création et d'annihilation ;
- d'expliquer la **quantification** des niveaux d'énergie dans des systèmes confinés et pour l'oscillateur harmonique ;
- de relier **les modes harmoniques** (ou **états propres** de l'hamiltonien) à des observables physiques.

Ainsi, on peut décrire les transitions entre l'état fondamental et les états excités d'un système quantique, comprendre leurs spectres d'énergie et étudier leurs interactions.