©Pierre Amiot, 2015
Département de Physique, Génie physique et Optique
Université Laval, Québec, Canada

Petite introduction à la théorie des groupes en physique

0. Cadre

Nous proposons ici une introduction brève et simplifiée à l'utilisation de la théorie des groupes utilisée en physique, surtout en physique quantique. Nous ne dirons qu'un mot groupes typiques en cristallisation, physique moléculaire et état solide.

Les lecteurs sont familiers avec une approche élémentaire de la mécanique quantique en physique, domaine où nous allons concentrer notre effort.

Le groupe est une structure mathématique qui constitue un outil utile pour étudier les conséquences des symétries et invariances de la Nature sur les formalismes que la physique utilise pour décrire les systèmes naturels.
Nous savons déjà que lorsqu'un système mécanique, classique ou quantique, obéit par exemple à un potentiel invariant sous rotation, appelé potentiel central, son Hamiltonien est alors invariant si on opère une rotation du système d'axes. Par exemple

,

qui peut décrire un système planétaire (*K = GMM')* ou électrostatique ( ), est clairement invariant sous rotation, puisque aucun de ses termes n'est modifié par une rotation du système d'axes. De fait, est un produit scalaire (un nombre) invariant sous rotation et les équipotentielles du potentiel *K/r* sont des cercles invariants sous rotation. Dans le formalisme canonique/quantique, on formalise cet effet en vérifiant que le crochet de Poisson/commutateur (même symbole ici) de *H* avec le moment cinétique orbital est nul

On note alors que les coordonnées d'angle n'apparaissent pas dans le Hamiltonien. On sait tirer de ce résultat que est une constante du mouvement, un résultat physique très important dans la solution de problèmes et dans la Nature qui est généralement invariante sous rotation : ces phénomènes sont indépendants de l'orientation sous laquelle on les observe. Pratiquement, il permet de réduire un problème en trois dimensions couplées à un problème à une seule dimension (radiale) et il explique pourquoi le système solaire est plan !

En mécanique quantique qui décrit le monde microscopique, la conséquence du commutateur est encore plus frappante, si possible. Ici sont des opérateurs agissant sur des fonctions d'onde . L'algèbre des commutateurs nous permet d'identifier immédiatement deux ( ) des trois nombres quantiques qui caractérisent la fonction d'onde (avant spin), solutionnant les parties en de l'équation de Schrödinger

ne laissant qu'une équation pour r (un peu comme en mécanique classique qui utilise l'équation de Newton/Lagrange/Hamilton). L'équation radiale donne le nombre quantique que nous noterons n et la fonction d'onde est alors

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

où la fonction Y est un harmonique sphérique, des fonctions bien connues et qui satisfont toujours les relations :

et il ne reste plus qu'à résoudre la partie r de l'équation de Schrödinger (intégrant l'indice ℓ pour tenir compte de l'effet centrifuge).

La rotation est un exemple où on voit bien qu'une invariance de la Nature se répercute, en classique et en quantique, par l'existence de constantes du mouvement dans nos formalismes mécanique pour la décrire (la Nature). Dans un cas comme dans l'autre, les conséquences de l'invariance de H sous rotation sont considérables et nous apprendrons à dire que les opérations qui laissent le système (donc *H*) invariant sont des éléments d'un groupe de rotation, ici *SO*(3) dont les *générateurs* (nous y reviendrons) sont

Il est cependant important de noter que si *H* est invariant sous rotation, ses solutions sont des orbites dans le cas classique et des orbitales dans le cas quantique, ne le sont pas nécessairement. En effet, les orbites planétaires sont généralement des ellipses, donc non invariantes sous rotation et il en va de même des orbitales en mécanique quantique. Cependant la symétrie sous rotation de *H* nous permet de classifier des familles de solutions en *représentations* qui jouent un rôle très important. Par exemple dans l'atome d'hydrogène, la valeur de identifie une représentation. Toute rotation sur un membre de cette *famille* donnera toujours une combinaison linéaire limitée aux membres de cette famille (même valeur de ℓ) . Ceci a des conséquences pratiques considérables, en particulier dans les calculs. La théorie des groupes nous fournit un outil mathématique qui permet d'identifier systématiquement ces *représentations* à partir des seules propriétés d'invariance du système (de *H* en fait) et de simplifier beaucoup les calculs.

L'exemple ci-dessus référait à une symétrie aisément visualisable, au sens où une rotation est une transformation à caractère géométrique. Il existe des familles de transformations un peu plus *générales* et moins *évidentes* où *H* n'est pas nécessairement laissé invariant, mais les équations qui en sont issues (de mouvement classique ou Schrödinger quantique) le sont, donc le système physique est invariant. Ça peut être le cas de la transformation de Gallilée en mécanique non relativiste ou de la transformation de Lorentz dans les systèmes relativistes. Ça peut aussi être le cas de la transformation de jauge en électromagnétisme qui n'a absolument rien de visualisable! On sait en effet en électromagnétisme que les champs électriques et magnétiques ne changent pas si on transforme les potentiels électromagnétiques de la façon suivante, appelée <u>transformation de jauge</u>

puisque

$$\vec{E} = -\nabla V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$
$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

En mécanique, le Hamiltonien d'une particule de charge q dans un champ électromagnétique est

$$H = \frac{\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2}{2M} + qV$$

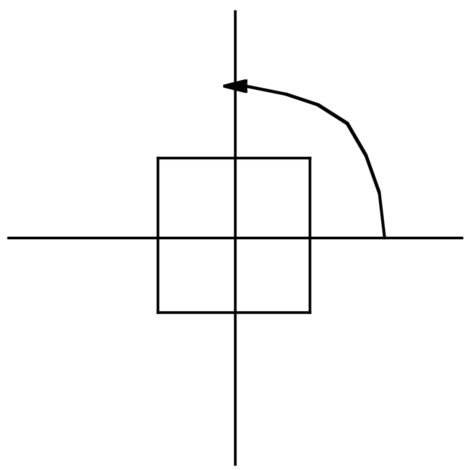
Il varie clairement si on fait la transformation de jauge illustrée ci-dessus, mais les équations du mouvement restent les mêmes ! Malgré son caractère un peu *ésotérique* et sans aucune apparence physique d'intérêt, la conséquence de cette symétrie est d'une importance capitale puisque la quantité conservée ici (la constante du mouvement) est nulle autre que la **charge électrique.** Ceci est tellement important que toutes nos théories de champ actuelles existantes sont des théories de jauges, ces dernières étant des généralisations de celle de l'électromagnétisme qui est décrite par le groupe $U(1)$.

En matière condensée (état solide), on étudie particulièrement les solides constitués d'arrangements ordonnés des atomes dans des réseaux appelés réseaux de Bravais. Ces réseaux ont des symétries sous translations selon certaines directions et sous rotation selon certains axes. Les groupes utilisés ici sont familiers aux physiciens spécialistes du domaine et souvent des chimistes et ingénieurs qui œuvrent dans le domaine. Ces groupes ne constituent pas notre centre d'intérêt et il vaut mieux les étudier ailleurs. Wikipedia donne une très bonne introduction à cette question.

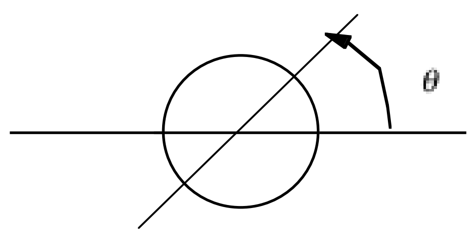
Note importante : nous parlons ici de varier par exemple l'angle de visualisation, non pas de faire tourner dynamiquement cet angle, ce qui générerait une accélération souvent appelée *centrifuge*. Les transformations, ici des rotations, inversions, déplacements… n'ont pas de caractère dynamique.

I. Définitions de base de la théorie des groupes

Nous développons d'abord les éléments de base de l'outil mathématique qu'est la théorie des groupes. La présente ne prétend pas être exhaustive et vise des scientifiques plutôt que des mathématiciens qui procéderaient de façon beaucoup plus rigoureuse. Pour des raisons pédagogiques, nous nous en tiendrons d'abord à des transformations géométriquement *visualisables simples*. À cet effet, nous nous pencherons d'abord sur les opérations de transformation elles-mêmes, sans introduire de dynamique. Nous notons que certains systèmes obéissent à des symétries discrètes, d'autres à des symétries continues :



Invariant sous rotation de π/2, π, 3π/2…
Symétrie discrète



Invariant sous rotation pour tout angle θ, symétrie continue

Ces deux exemples sont invariants sous rotation, donc visualisables. À gauche, on doit faire des rotations de $\pm n\pi / 2$, alors qu'à droite toute valeur de θ laisse le système invariant. Les groupes décrivant ces deux cas seront différents, reflétant la nature, l'*état* différent de chacun. À gauche, les symétries sont discrètes, donc dénombrables, alors qu'à droite elles sont continues, donc non dénombrables.

Il est généralement admis qu'il est pédagogiquement plus simple de commencer par les groupes discrets, ce que nous ferons ici.

Définition d'un groupe

Un groupe G est un ensemble d'éléments $g_1, g_2, g_3, ...$ (on écrit $g_i \in G$) doté d'une opération pour les combiner, opération que nous appellerons *produit*. L'ensemble et le produit doivent satisfaire les conditions suivantes

a) Si g_i et $g_j \in G$, alors le produit $g_i g_j \in G$

b) Le produit est associatif $g_i(g_j g_k) = (g_i g_j) g_k$

c) Il existe dans G un élément unité I tel que $Ig_i = g_i = g_i I$

d) Pour chaque élément $g_i \in G$, il existe un élément inverse, généralement noté $g_i^{-1} \in G$ tel que $g_i^{-1} g_i = I = g_i g_i^{-1}$

Un groupe fini a un nombre fini d'éléments, qui peuvent donc être *comptés* à l'aide d'un indice discret $g_1, g_2, g_3, ... g_n$, où n qui est le nombre d'éléments s'appelle **l'ordre du groupe.**

On doit noter que le produit n'est, en général, pas commutatif, ce qui signifie qu'inverser l'ordre des transformations ne mène pas au même état final

$g_j g_k \neq g_k g_j$, donc le commutateur $\left[g_j, g_k\right] \neq 0$ en général.

Par ailleurs si nous avons un groupe dont tous les éléments commutent, i.e. tous les produits dans ce groupe sont commutatifs, alors le groupe est dit **Abélien**.

La notation utilisée jusqu'ici est adéquate pour des groupes finis qui ont un indice discret.

Pour les cas continus, comme la rotation du cas à droite ci-dessus, on doit employer un indice continu, possiblement noté $g(\alpha)$ où α est continu comme un angle. L'ordre du groupe est alors infini. Il est possible que le domaine de variation de α (ou un angle θ) soit fini, comme dans le cas précité où on a $g(\theta)$ où le domaine $0 \leq \theta \leq 2\pi$ couvre toutes les situations possibles (il est inutile de considérer $2\pi \leq \theta \leq 4\pi$, parce qu'on repasse par les mêmes états). Lorsque le domaine de variation du paramètre est fini, le groupe continu est dit **compact**. Ceci a des conséquences.

1. Sous-groupes

Un sous-groupe H de G est un sous-ensemble de G tout en étant lui-même un groupe et on écrit $H \subset G$. L'ordre de H est nécessairement plus petit ou égal à celui de G. Tout élément h_i de H est évidemment un élément de G. Notons quelques propriétés des sous-groupes.

a) L'élément unité I est un sous-groupe (trivial) de G

b) Un sous-groupe H peut être abélien, même si G ne l'est pas

c) Si $g \in G$ et si H est un sous-groupe de G, alors on appelle *complexe associé à gauche* et on note gH l'ensemble des éléments $gh_1, gh_2, ...gh_k$. On identifie deux cas

   i) Si g appartient à H, disons $g = h_i$, alors $gh_j = h_i h_j \in H$ et $gH = H$. Ce cas trivial est sans intérêt. Nous n'y reviendrons pas.

   ii) Si $g \notin H$, alors gH n'est pas un groupe et le nom de complexe associé à gauche (left coset) est généralement réservé à ce cas et nous supposerons ici que c'est toujours la situation qui prévaut.

d) Si H est un sous-groupe de G, alors son ordre est un diviseur de l'ordre (fini) de G. Un groupe G doit donc être au moins d'ordre 4 pour avoir un sous-groupe non trivial. Si l'ordre de G est un nombre premier, ce dernier n'a pas de diviseur et G n'a pas de sous-groupe non trivial.

2. Sous-groupes, conjugués, quotients, classes…

Si a, b et g sont des éléments de G et que

$$b = g^{-1}ag \quad \text{(g pas unique)}$$

alors on dit de a et de b qu'ils sont des éléments conjugués. L'ensemble des éléments distincts obtenus de l'opération $b = g_i^{-1}ag_i$ pour i = 1, 2, 3…n, i.e. en faisant cette opération avec un a et avec tous les éléments g_i de G, s'appelle **une classe** de G. On note que l'élément unité forme une classe par lui-même.

Si b et a sont conjugués, il y a donc au moins un g_i tel que $b = g_i^{-1}ag_i$, alors les conjugués de a et ceux de b forment une seule et même classe, sinon ces deux classes n'ont aucun élément commun. Ainsi chaque élément de G appartient à une seule classe et la totalité du groupe peut être subdivisée en classes. Cette subdivision a des applications importantes.

Si H est un sous-groupe de G et que g appartient à G mais pas à H, alors gH est un coset gauche et n'est pas un groupe si on fait courir g sur tout G. Par contre,

gHg^{-1} = sous-groupe dit **sous-groupe *conjugué***.

Si $g_i H g_i^{-1} = H$ pour tout $g_i \in G$, alors H est appelé **sous-groupe invariant** de G et on peut montrer que dans ce cas, H contient tous les éléments d'une ou de plusieurs classes de G.

G est un groupe simple si son seul sous-groupe invariant est l'élément unité I. G est un groupe semi-simple si son seul sous-groupe invariant abélien est l'élément unité I.

On note que si H est un sous-groupe invariant de G, alors $g_i H g_i^{-1} = H$ pour tout $g_i \in G$ Multipliant de la droite par g_i on obtient

$$g_i H g_i^{-1} g_i = g_i H = H g_i \quad \Rightarrow \quad [g_i, H] = 0$$

Groupe quotient : L'ensemble formé par un sous-groupe invariant H et ses complexes associés $g_1 H, g_2 H, \ldots g_n H$ forme lui-même un groupe pour lequel H joue le rôle d'élément unité. On l'appelle le groupe quotient et on le note

$$G / H = \{H, g_1 H, g_2 H, \ldots, g_n H\}$$

On note que chaque élément du groupe quotient contient lui-même k éléments, k étant l'ordre de H et que, sauf H qui joue le rôle d'élément unité, aucun des autres éléments n'est un groupe. On comprend *mieux* l'expression groupe quotient lorsqu'on vérifie que

$$G = (G / H) H$$

3. Isomorphisme et homomorphisme

Isomorphisme : Deux groupes, G et G' sont isomorphes s'il existe entre leurs éléments une relation biunivoque qui conserve leurs lois de multiplication respectives, i.e.

a) À chaque élément $g_i \in G$ correspond un et un seul élément $g_i' \in G'$ et réciproquement.

b) Si g_i correspond à g_i', g_j à g_j' et g_k à g_k', alors $g_i g_j = g_k$ implique nécessairement que $g_i' g_j' = g_k'$ et inversement

c) Il va de soi que ces deux groupes sont du même ordre, donc comptent le même nombre d'éléments.

d) Deux groupes isomorphes sont notés $G \approx G'$

Homomorphisme : Deux groupes sont homomorphes s'il existe une correspondance entre tous leurs éléments respectifs, relation qui n'est pas nécessairement biunivoque, donc *G* est homomorphe à *G*' si

a) À chaque élément $g_i \in G$ correspond un et un seul élément de $g' \in G'$ mais à chaque élément $g' \in G'$ correspond au moins et peut-être plusieurs éléments de *G*.

b) Si $g_k = g_i g_j \Rightarrow g'_k = g'_i g'_j$, mais pas inversement

Et on écrira $G \sim G'$.

Si *G* est isomorphe à G', i.e. $G \approx G'$

alors on peut également dire que $G' \approx G$.

Par contre, si *G* est homomorphe à G', i.e. $G \sim G'$, a lors il est évident que ça n'implique pas que $G' \sim G$

Mentionnons quelques propriétés et conséquences

a) Si *G* a un sous-groupe invariant *H*, alors *G* est homomorphe au groupe quotient *G/H*, i.e. *G* ~ *G/H*.

b) Si *G* est homomorphe à G', l'ensemble *H* des éléments de *G* homomorphes à *I*' (l'élément unité de G') forme un sous-groupe invariant de *G*, tel que *G/H* est isomorphe à G', i.e. *G/H* ~ G'. On appelle parfois l'ensemble *H* le ***centre de G***.

4. Transformations, tables de multiplication…

Les groupes qui nous intéressent surtout sont des groupes de transformation. De ce fait, l'élément $g_i \in G$ représente une transformation opérée sur un système physique. Si ce système est décrit par le symbole ϕ, alors le résultat de la transformation est décrit par $g_i\phi$.

Notons que le produit $g_i g_j$ est lui-même dans G et représente aussi une transformation du système physique. Nous pouvons écrire son résultat comme $g_i g_j \phi$. Il est très important de noter que l'ordre des opérations doit être suivi. Ici, une première transformation g_j est appliquée au système, suivie de la transformation g_i. En général, le résultat final est différent si on inverse l'ordre des transformations. Un outil simple et très utile en théorie des groupes (discrets) est la table de multiplication. Elle se présente sous la forme suivante, où la colonne de gauche fait la liste des opérations multipliant de la gauche les opérations apparaissant sur la ligne supérieure. La colonne de gauche et la ligne supérieure ne font donc pas vraiment partie de la table. Cela donne

	g_1	g_2	g_3	g_4	.	g_n
g_1	g_1g_1	g_1g_2	g_1g_3	g_1g_4	.	g_1gn
g_2	g_2g_1	g_2g_2	g_2g_3	g_2g_4	.	g_2g_n
g_3	g_3g_1	g_3g_2	g_3g_3	g_3g_4	.	g_3g_n
g_4	g_4g_1	g_4g_2	g_4g_3	g_4g_4	.	g_4g_n
. .	. .	. .	. .	. .	.	. .
g_n	g_ng_1	g_ng_2	g_ng_3	g_ng_4	.	g_ng_n

Cette table est l'outil premier pour le calcul et l'identification des différentes quantités et expressions que nous avons définies ci-haut.

Lemme de réarrangement : chaque ligne et chaque colonne de la table de multiplication contient chaque élément du groupe une seule fois, comme un Sudoku. Ainsi, tous les éléments du groupe se retrouvent sur chaque ligne et dans chaque colonne.

5. Quelques exemples de groupes (finis).

a. Groupe de permutation : S_n

Le groupe S_n est composé des opérations qui permutent/interchangent n objets (distincts ou identifiables) entre eux. Ce groupe contient n ! éléments, donc son ordre est n !

b. Le groupe S_2 est un cas particulier de S_n et il permute deux objets, appelés ici 1 et 2. Il contient 2 ! = 2 éléments qui sont clairement l'identité I qui ne fait rien et joue le rôle de l'unité, et une opération qui permute 1 et 2 notée ici a. La table de multiplication est triviale

	I	a
I	I	a
a	a	I

Ce groupe est clairement cyclique, i.e. les différents éléments sont du type a, $a^2 = I$, $a^3 = a$… Le groupe d'ordre 2 est unique (ou ils le sont tous). On peut imaginer deux objets situés à gauche et à droite d'une ligne (imaginaire). Ce groupe décrit l'inter-change des deux objets. Deux permutations nous ramènent à la situation initiale et sont donc tout-à-fait équivalentes à l'opération identité qui ne fait rien.

Remarque : plus tard, nous introduirons des représentations matricielles des éléments des groupes. Nous verrons qu'ici il y a deux représentations non équivalentes de matrices 1x1 (des nombres !). La $1^{\text{ère}}$ est $I = 1$, $a = 1$ et la deuxième est $I = 1$, $a = -1$. On vérifie trivialement que ces deux représentations satisfont la table de multiplication si le produit entre les éléments est défini comme le produit algébrique ordinaire.

c. Le groupe S_3 a 3 ! = 6 éléments qui correspondent aux 6 façons qui existent pour agencer 3 objets. On peut obtenir ces 6 arrangements en partant de la *mère*, un état de référence, disons la séquence {1, 2, 3}. Appelons $s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6$ les 6 opérations de réarrangement, définis comme suit

$s_1\{1,2,3\}=\{1,2,3\}$ l'opération identité I

$s_2\{1,2,3\}=\{1,3,2\}$ intervertit 2 et 3, noté $(2,3)$

$s_3\{1,2,3\}=\{3,2,1\}$ intervertit 1 et 3

$s_4\{1,2,3\}=\{2,1,3\}$ intervertit 1 et 2

$s_5\{1,2,3\}=\{2,3,1\}$ tourne cycliquement 1,2,3

$s_1\{1,2,3\}=\{3,1,2\}$ tourne cycliquement deux fois

Calculons maintenant la table de multiplication en omettant d'inclure $s_1 = I$ dont le rôle est trivial dans une multiplication. Par exemple

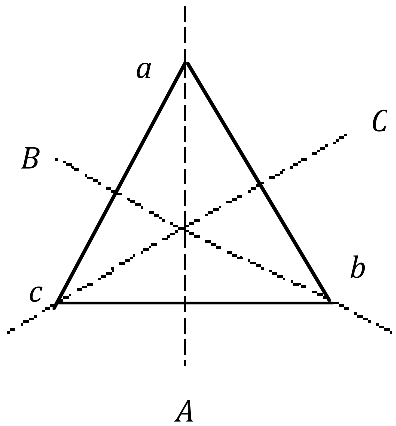
$s_3 s_4\{1,2,3\}=s_3\{2,1,3\}=\{3,1,2\}\equiv s_6\{1,2,3\}$ et c'est le résultat retrouvé à la 3e colonne de la 2e ligne : $s_3 s_4 = s_6$. Au final, le résultat est

	s_2	s_3	s_4	s_5	s_6
s_2	I	s_6	s_5	s_4	s_3
s_3	s_4	I	s_6	s_2	s_4
s_4	s_6	s_5	I	s_3	s_2
s_5	s_3	s_4	s_2	s_6	I
s_6	s_4	s_2	s_3	I	s_5

On voit que s_2, s_3, s_4 sont leur propre inverse, alors que s_5 et s_6 sont l'inverse l'un de l'autre. Les transformations ne sont pas commutatives, par exemple $s_2 s_3 \neq s_3 s_2$, ce groupe n'est pas abélien. Il est aussi clair que les éléments I, s_5 et s_6 forment un sous-groupe, puisqu'ils sont fermés sur eux-mêmes. Par contre les autres éléments ne forment pas un sous-groupe, par exemple parce que $s_2 s_3 = s_6$ … Cependant, les ensembles $\{I,s_2\},\{I,s_3\},\{I,s_4\}$ sont tous des sous-groupes.

d. Un exemple : Groupe d'invariance du triangle équilatéral

Ce triangle a des sommets identifiés *a, b, c* et nous définissons trois droites dans le plan du papier, *A, B, C*, qui ne seront pas affectées par les transformations ; elles servent de référence pour certaines opérations : la droite *A* passe par le sommet *a*… Il y a une droite perpendiculaire au plan papier et passant par le centre du triangle, définissant l'axe de rotation.



Il y a 6 opérations qui laissent le triangle inchangé, si on considère que les 3 sommets sont totalement équivalents. Nous les noterons ici de la façon suivante

I : l'opération unité qui ne fait rien

A : réflexion p/r à la droite A, donc réflexion gauche/droite, $b \leftrightarrow c$

B : réflexion p/r à la droite B, permute $a \leftrightarrow c$

C : réflexion p/r à la droite C, permute $a \leftrightarrow b$

R_1 : rotation horaire de 120° selon l'axe de rotation, $a \to b \to c \to a$

R_2 : rotation horaire de 240° selon l'axe de rotation,

<u>Table de multiplication</u>

Nous calculons ici la table de multiplication, ici en oubliant l'opération unité (inutile), ce qui nous donne, la ligne horizontale multipliant la verticale

On constate facilement qu'en faisant l'équivalence que cette table de multiplication est identique à celle de l'exemple précédent (S_3), ces deux groupes sont donc isomorphes. Pour la théorie des groupes, ils sont identiques. Tout ce qu'on peut dire de l'un ici, on peut le dire de l'autre. Ici encore, A, B, C sont leur propre inverse, alors que sont l'inverse l'un de l'autre, puisqu'il est clair que l'inverse de qui serait une rotation de -120˚ donne exactement le même résultat qu'une rotation de +240˚.

Nous avons les mêmes sous-groupes que pour S_3 et nous notons que tous ces sous-groupes sont cycliques, par exemple, . On notera aussi que ces groupes sont d'ordre 2 ou 3, qui sont des diviseurs de l'ordre du groupe initial (6).

Classes

Pour identifier les classes du groupe. Débutons avec R_1 et utilisons la table de multiplication pour calculer

On voit donc que et forment une classe puisqu'ils sont conjugués. Débuter avec donnera évidemment la même classe.

De façon similaire, A, B et C forment une classe, comme le lecteur est invité à le vérifier en exercice. Les sous-groupes (I, A), (I, B) et (I, C) ne sont pas invariants, parce qu'aucun d'entre eux contient tous les éléments d'une classe. Par contre, le sous-groupe (I, R_1, R_2) est invariant parce qu'il contient tous les éléments de la classe constituée des éléments R_1, R_2. Ainsi le groupe S_3 n'est ni simple, ni semi-simple, puisqu'il compte un sous-groupe invariant d'ordre 3 et abélien.

Quotient

Puisque S_3 a un sous-groupe invariant, $H = (I, R_1, R_2)$, on peut définir le groupe quotient S_3/H qui a pour éléments, H lui-même et ses éléments associés. Les associés possibles de H sont où L est défini à la $3^{\text{ième}}$ ligne. Ainsi le groupe quotient compte deux *éléments* $S_3/\text{H} = (H, L)$. Chacun de ces *éléments* compte plusieurs éléments de départ. Toujours à partir de la table de multiplication, on peut calculer que

dont nous ne retiendrons que les éléments constitutifs distincts (une fois), ce qui donne

Nous avons donc une situation où H, le sous-groupe invariant de S_3, joue le rôle d'élément unité du groupe quotient $S_3/\text{H} = (H, L)$, avec comme seul autre élément L, qui est son propre inverse. On peut aussi dire que c'est un groupe cyclique d'ordre 2. Géométriquement, H comprend les éléments constitutifs (I, R_1, R_2) qui sont des transformations qui conservent l'ordre des sommets (a, b, c), alors que l'autre élément du groupe quotient $L = (A, B, C)$ comprend les éléments constitutifs qui changent l'ordre des sommets. Ainsi, le groupe quotient décrit une invariance plus globale des transformations envisagées.

II. Représentation d'un groupe

1. Matrices carrées N x N.

Nous savons qu'un ensemble M de matrices carrées $N \, x \, N$,

$M =$ est doté d'une opération appelée produit matriciel. Ce produit est associatif, au sens où

Ce produit peut être ou non commutatif. Si de plus nous avons les propriétés suivantes i)

ii) pour tout , il y a au moins un , tel que

iii) où I est une des matrices de M et est telle que $IM_i = M_iI$ pour toute $M_i \in M$

Dans ce cas, M forme un groupe et I est la matrice unité, $I_{ij} = \delta_{ij}$ (1 sur toute la diagonale et zéro ailleurs).

Il est intéressant de voir qu'une matrice N x N peut être vue comme opérant une **transformation linéaire** sur des vecteurs (des vecteurs à une colonne par exemple) d'un espace linéaire comptant N vecteurs de base que l'on peut noter $\{|k\rangle\} = |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle ... |N\rangle$. Le vecteur $|k\rangle$ est lui-même constitué de N lignes sur une colonne et si on note k_i sa composante apparaissant à la ligne i, alors $M|k\rangle = \textit{vecteur colonne}$ dont la $j$ème composante est

$$\left(M|k\rangle\right)_j = \sum_{i=1}^{N} M_{ji}k_i = \left(|k'\rangle\right)_j \quad \text{ou au complet}$$

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & \dots & M_{1N} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & \dots & M_{2N} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & \dots & M_{3N} \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & \dots & M_{4N} \\ . & . & . & \dots & \\ M_{N1} & M_{N2} & M_{N3} & & M_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \\ . \\ k_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k'_1 \\ k'_2 \\ k'_3 \\ k'_4 \\ . \\ k'_N \end{bmatrix}$$

<u>La notion de transformation linéaire va devenir très importante, d'une certaine façon *changeant* une transformation non linéaire en transformation linéaire, via la notion de représentation. C'est une opération capitale.</u>

2. Représentation linéaire d'un groupe

Une représentation d'un groupe G est un ensemble M de matrices carrées non singulières $M_1, M_2, M_3, ... M_N$ telles qu'on peut faire correspondre à chaque élément du groupe, $g_i \in G$, une de ces matrices, disons M_i (pas nécessairement distinctes) de telle sorte que

$$g_i g_j = g_k, \quad g_i, g_j, g_k \in G$$

implique nécessairement que

$$M_i M_j = M_k, \quad M_i, M_j, M_k \in M$$

La matrice M_i *représente* ou joue ici le rôle de l'élément g_i du groupe G. Si les matrices sont N x N, on dit que la représentation est à **N dimensions**.

Si les matrices représentant des éléments distincts de G sont elles-mêmes distinctes, alors G et M sont isomorphes : $G \approx M$.

Par contre, si une même matrice représente plus d'un élément de G, alors G est homomorphe à M: $G \sim M$.

Chaque groupe a au moins une représentation (matricielle) triviale où chaque élément du groupe est représenté par la matrice unité 1 x 1, à savoir le nombre un. Il est évident qu'une telle représentation (à une dimension) satisfait trivialement toutes les conditions énoncées ci-dessus pour être une représentation du groupe, mais est sans grand/aucun intérêt !

Nous trouvons pratique de noter D ou $D(g)$ une représentation quelconque, avec $D(g_i)$ notant la matrice représentant l'élément g_i.

Deux représentations, D et D' sont dites équivalentes si elles sont reliées par une matrice S non singulière, au sens où

$$D'(g) = S^{-1}D(g)S$$

On note que cette opération s'applique à toutes les matrices $D(g_i)$, chacune donnant une *nouvelle* matrice $D'(g_i) \in D'(g)$. En pratique, nous considérons $D'(g_i)$ et $D(g_i)$ comme *identiques*, au sens d'équivalentes ou non discernables.

La représentation triviale déjà mentionnée, qui est à une dimension, est ici la première à être identifiée et nous la noterons $D^{(1)}(g)$, l'indice supérieur signifiant qu'elle est la représentation #1 et nous savons que $N_1 = 1$ (une dimension). Imaginons que nous trouvons une deuxième représentation, notée $D^{(2)}(g)$ et de dimension N_2, i.e. dont les matrices sont $N_2 \times N_2$. Il est alors possible de former une nouvelle représentation de dimension $N_n = N_1 + N_2$, notée

$$D^{(n)}(g) = D^{(1)}(g) \oplus D^{(2)}(g)$$

le symbole $\oplus$ représentant ici une ***<u>nouvelle</u>*** **opération *d'addition*** où

$$D^{(n)}(g) = \begin{bmatrix} D^{(1)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{bmatrix}$$

où les matrices sommes ont $N_1 + N_2$ lignes et $N_1 + N_2$ colonnes. Une telle représentation sera dite **réductible** en deux représentations, $D^{(1)}(g)$ et $D^{(2)}(g)$, chacune capable de représenter le groupe. Si une représentation ne peut pas être ramenée à cette forme (blocs diagonaux) par une opération d'équivalence, i.e. du type $D'(g) = S^{-1}D(g)S$, alors une telle représentation est dite **irréductible**.

Les représentations irréductibles d'un groupe, $D^{(n)}(g) = D^{(1)}(g), D^{(2)}(g)...$, sont les blocs nécessaires et suffisants pour faire l'étude du groupe. Elles ont des applications physiques importantes. Une représentation quelconque du groupe peut toujours s'écrire comme une *combinaison linéaire* (sous l'opération $\oplus$) de représentations irréductibles. En d'autres termes, une représentation quelconque de dimension N et notée $D'(g)$ est toujours équivalente à une représentation $D(g)$ par

$$D'(g) = S^{-1}D(g)S$$

où, par exemple

$$D(g) = \begin{bmatrix} D^{(1)}(g) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D^{(1)}(g) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D^{(2)}(g) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D^{(3)}(g) \end{bmatrix}$$

est clairement réductible et nous l'écrirons ici en fonction des représentations irréductibles

$$D(g) = 2D^{(1)}(g) \oplus D^{(2)}(g) \oplus D^{(3)}(g)$$

Nous énonçons ici sans démonstration quelques théorèmes importants mais intuitivement acceptables. Le présent document ne prétend pas être exhaustif, plutôt une rapide introduction ou un petit aide-mémoire.

a) Chaque représentation est équivalente à une représentation unitaire (possiblement orthogonale), i.e. les matrices représentant les éléments d'un groupe peuvent toujours être choisies comme des **matrices unitaires (orthogonales)**

$$D^{\dagger}(g)D(g) = I \quad \text{(l'unité)} \quad \text{ou , matrice par matrice}$$

$$D^{\dagger}(g_i)D(g_i) = I = \text{matrice unité} \quad \text{ou, par composantes}$$

$$\sum_{\alpha} D_{\alpha\beta}{}^{*}(g_i)D_{\alpha\gamma}(g) = \delta_{\beta\gamma}$$

NOTE : Dans ce qui suit, nous ne parlerons plus que de représentations unitaires

b) Une matrice, disons A qui commute avec chaque matrice d'une représentation irréductible *D(g), i.e.* $AD(g) = D(g)A$, pour tout $g \in G$, est un multiple de la matrice unité I.

c) Si $D^{(1)}(g)$ et $D^{(2)}(g)$ sont deux représentations irréductibles et s'il existe une matrice A $\left(N_1 \times N_2\right)$ telle que

$$AD^{(2)}(g) = D^{(1)}(g)A, \text{ pour tout } g \in G$$

alors, soit $A = 0$, soit $N_1 = N_2$, A^{-1} existe et $D^{(1)}(g)$ et $D^{(2)}(g)$ sont équivalentes.

d) Supposons que le groupe G contienne h éléments et notons $D^{(1)}(g)$, $D^{(2)}(g)$... ses représentations irréductibles non équivalentes de dimension N_1, N_2…. Sans ambiguïté, notons $D^{(i)}_{\alpha\beta}(g)$, l'élément (α, β) de la matrice représentant l'élément g du groupe dans la représentation irréductible $D^{(i)}(g)$. Nous avons alors l'important résultat que la somme sur les éléments du groupe donne

$$\sum_g^G D^{(i)}_{\alpha\beta}(g)^* D^{(j)}_{\gamma\delta}(g) = \frac{h}{N_i}\delta_{ij}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}$$

Un élément (α, β) donné de la $i^{\text{ième}}$ représentation prendra donc h valeurs différentes lorsque nous *balayons* sur les éléments g du groupe. On peut penser à ces valeurs comme étant les composantes d'un vecteur à h composantes. L'expression ci-dessus nous dit que si on prend le *produit scalaire* de ce *vecteur* avec lui-même, le résultat est h/N_i, alors qu'il reste *orthogonal* à tout autre *vecteur* de la même représentation ou à tout *vecteur* d'une autre représentation. Or, une représentation $D^{(i)}(g)$ a $N_i \times N_i$ entrées pour un g donné et donc on peut y construire N_i^2 de tels *vecteurs*. Au total, nous aurons donc

$$N_1^2 + N_2^2 + ... = \sum_i^{irr.} N_i^2 \quad \text{vecteurs}$$

Mais ces *vecteurs* ont h composantes et il ne peut y avoir plus de h vecteurs linéairement indépendants, c'est donc là le nombre maximum de *vecteurs* orthogonaux possibles et nous devons avoir, sommant sur les représentations irréductibles que

$$N_1^2 + N_2^2 + ... = \sum_i^{irr.} N_i^2 \leq h$$

En fait, c'est le signe d'égalité qui prévaut et nous avons le résultat

$$\sum_{i}^{irr.} N_i^2 = h$$

Ce résultat est très important, parce que la somme courre sur toutes les représentations irréductibles non équivalentes de *G* et que *h* est le nombre d'éléments de *G*. <u>Cette contrainte est donc très limitative (pour les groupes discrets).</u>

<u>Un exemple :</u> Prenons le groupe S_3 dont la table de multiplication apparaît plus haut et qui contient 6 éléments, donc $h = 6$. Les représentations irréductibles possibles sont donc telles que $N_1^2 + N_2^2 + ... = 6$.

Il n'y a ici qu'une solution possible, en dehors de la solution hyper-triviale $N_1 = N_2 = N_3 = N_4 = N_5 = N_6 = 1$ qui est sans intérêt, et c'est la solution $N_1 = 1, N_2 = 1, N_3 = 2$.

La première représentation est triviale et tous ses éléments sont 1x1, le chiffre 1.

La seconde représentation est également faite de *matrices* 1x1 et la table de multiplication permet

$$s_1 = I = 1, s_2 = -1, s_3 = -1, s_4 = -1, s_5 = 1, s_6 = 1$$

La troisième représentation est faite de matrices 2x2. Ici, c'est moins facile, mais la table de multiplication donne les renseignements nécessaires. Évidemment, on prend

$s_1 = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ = identité. La table de multiplication nous permet, avec un peu d'efforts, de déterminer les autres matrices de cette représentation. Nous en donnons simplement le résultat

$$s_2 = A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad s_3 = B = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

$$s_4 = C = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}, \quad s_5 = R_2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

$$s_6 = R_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}$$

3. Caractères, classes et représentations irréductibles (RI)

L'exemple ci-dessus démontre que l'obtention des représentations sous forme matricielle peut devenir rapidement une tâche ardue ! d'autant plus que, pour chaque représentation obtenue, il y a un nombre infini de représentations équivalentes, *D'* , obtenues par $D'(g) = S^{-1}D(g)S$ où la seule contrainte sur *S* est qu'elle ne soit pas singulière (S^{-1} existe). Il y a un nombre infini de telles matrices et toutes ces représentations sont parfaitement équivalentes, i.e. sont la même représentation !

Nous devons chercher un test plus *universel* pour identifier une RI. À cet effet, nous définirons le caractère $\chi^{(i)}(g)$ comme la trace de la matrice représentant g dans la RI $D^{(i)}$, i.e.

$$\chi^{(i)}(g) = \sum_{\alpha}^{N_i} D^{(i)}_{\alpha\alpha}(g)$$

A priori, les caractères ne semblent avoir aucune relation avec les RI, au moins pas directement. En fait, nous énonçons sans le prouver ici que les caractères sont reliés aux classes et un théorème nous dit que le nombre de RI non équivalentes est égal au nombre de classes et les éléments d'une même classe sont reliés par la valeur de leur caractère, d'où l'intérêt !

Reprenons quelques uns de ces points avec un minimum de démonstrations (la théorie des groupes est ici un outil et non un sujet d'étude en soi). Il est assez simple de voir que, dans une représentation donnée, tous les éléments d'une même classe ont le même caractère. De fait, si g_1, g_2 appartiennent à la même classe de *G*, alors, pour tout $h \in G$, nous avons

$$g_2 = hg_1h^{-1}$$

qui doit se vérifier dans toute représentation de *G*, disons *D*

$$\begin{aligned}
& D(g_2) = D(h)D(g_1)D(h^{-1}) \\
\Rightarrow \quad & \chi(g_2) = Tr\Big(D(h)D(g_1)D(h^{-1})\Big) \\
& \qquad \equiv Tr\Big(D(h^{-1})D(h)D(g_1)\Big) : \text{ propriété de la trace} \\
& \qquad = Tr\big(ID(g_1)\big) = Tr\big(D(g_1)\big)
\end{aligned}$$

Nous prenons S_3 comme exemple illustrant ce résultat. Nous savons déjà ici qu'il y a 3 RI, déjà identifiées et notées $D^{(1)}(g), D^{(2)}(g), D^{(3)}(g)$

$$
\begin{array}{l|ccc}
 & \chi^{(1)} & \chi^{(2)} & \chi^{(3)} \\
\hline
s_1: & 1 & 1 & 2 \\
s_2: & 1 & -1 & 0 \\
s_3: & 1 & -1 & 0 \\
s_4: & 1 & -1 & 0 \\
s_5: & 1 & 1 & -1 \\
s_6: & 1 & 1 & -1
\end{array}
\begin{array}{l}
\}\ \text{famille \#1} \\
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array}\right\}\ \text{famille \#2} \\
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \end{array}\right\}\ \text{famille \#3}
\end{array}
$$

Nous identifions trois classes, une triviale (élément unité) et deux non triviales identifiées à l'aide de $\chi^{(2)}$ et de $\chi^{(3)}$. Notons-les C_1, C_2 et C_3

C_1 contient s_1 avec $\chi^{(1)}=1, \chi^{(2)}=1, \chi^{(3)}=2$
C_2 contient $\{s_2, s_3, s_4\}$ avec $\chi^{(1)}=1, \chi^{(2)}=-1, \chi^{(3)}=0$ pour tous ses éléments
C_3 contient $\{s_5, s_6\}$ avec $\chi^{(1)}=1, \chi^{(2)}=1, \chi^{(3)}=-1$ pour tous ses éléments

On remarque que les caractères de la première ligne (la classe triviale) donnent les dimensions des RI qui sont en même nombre que les classes, même si les regroupements qu'on retrouve dans les classes n'ont rien à voir avec les RI. En effet, chaque RI compte un élément pour chaque élément du groupe.

Dans ce cas, si h est le nombre d'éléments du groupe, que S est le nombre de classes et p_i le nombre d'éléments dans la classe C_i, alors on peut démontrer que

$$\sum_{k=1}^{S} p_k \chi^{(i)}(C_k)^* \chi^{(j)}(C_k) = h\delta_{ij}$$

Cette relation fait partie des relations d'orthogonalité des caractères, le facteur p_k jouant le rôle de *poids.* Si on cherche l'orthonormalité, alors le *poids* est p_k/h.

Considérons une représentation réductible $D(g)$ d'un groupe G. Après une transformation *appropriée*, elle prendra la forme équivalente

$$D(g) = \begin{bmatrix} D^{(a)}(g) & 0 & 0 & .... & 0 \\ 0 & D^{(b)}(g) & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & D^{(c)}(g) & ... & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ... & \end{bmatrix}$$

où les $D^{(a)}(g), D^{(b)}(g)$ … sont des RI. Ce résultat s'écrit

$$D(g) = D^{(a)}(g) \oplus D^{(b)}(g) \oplus D^{(c)}(g) \oplus ...$$

Clairement, le caractère qui est une trace s'écrit, pour une classe *C*, comme

$$\chi(C) = \chi^{(a)}(C) + \chi^{(b)}(C) + \chi^{(c)}(C) + ...$$

Supposons que la représentation réductible $D(g)$ contienne c_1 fois $D^{(1)}(g)$, c_2 fois $D^{(2)}(g)$ … , on peut alors écrire de façon équivalente

$$D(g) = c_1 D^{(1)}(g) \oplus c_2 D^{(2)}(g) \oplus ... = \sum_{i=1}^{RI} c_i D^{(i)}(g)$$

et alors $\chi(C_k) = \sum_i^{RI} c_i \chi^{(i)}(C_k)$ où la somme est sur les RI (représentations irréductibles). Nous multiplions maintenant de chaque côté par $p_k \chi^{(i)}(C_k)^*$ et sommons sur *k* (les classes), ce qui donne

$$\begin{aligned}\sum_k^S p_k \chi^{(j)}(C_k)^* \chi^{(i)}(C_k) &= \sum_k^S \sum_i^{RI} c_i p_k \chi^{(j)}\left(C_k\right)^* \chi^{(i)}\left(C_k\right) \\ &\equiv \sum_i^{RI} c_i \sum_k^S p_k \chi^{(j)}\left(C_k\right)^* \chi^{(i)}\left(C_k\right) \\ &= \sum_i^{RI} c_i h \delta_{ij} = c_j h\end{aligned}$$

et donc nous pouvons calculer le nombre de fois que la RI(*j*) apparaît dans le représentation réductible $D(g)$ en isolant le coefficient

$$c_j = \frac{1}{h} \sum_k^S p_k \chi^{(j)}\left(C_k\right)^* \chi\left(C_k\right) = \overline{\chi^{(j)}(g)\chi(g)} = \textit{moyenne} \text{ sur le groupe .}$$

Exemple : Représentation 3D de S_3

Afin d'illustrer l'utilité de ces expressions, nous allons considérer une représentation à 3 dimensions de S_3 et nous allons la décomposer en RI. Il est facile de composer une représentation en 3D pour *S*, puisque c'est le groupe de permutation de 3 objets que nous *plaçons* dans un vecteur colonne et nommons 1, 2, 3.

Il est trivial de créer s_1 qui est l'identité et qui ne change rien, c'est la matrice unité en 3x3 ou

$$s_1\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}$$

La transformation s_2 ne touche pas à 1 et échange 2 et 3 et il est facile de voir que c'est ce que fait la matrice s_2 ci-dessous

$$s_2\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\3\\2\end{bmatrix}$$

Il est aussi facile de construire les autres matrices de la représentation

$$s_3=\begin{bmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{bmatrix},\quad s_4=\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}$$

$$s_5=\begin{bmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{bmatrix},\quad s_6=\begin{bmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{bmatrix}$$

Nous reconnaissons facilement la présence des trois classes

$\chi(s_1)=3$ définit C_1 : $\chi(C_1)=3$

$\chi(s_2)=\chi(s_3)=\chi(s_4)=1$ définit C_2 : $\chi(C_2)=1$

$\chi(s_5)=\chi(s_6)=0$ définit C_3 : $\chi(C_3)=0$

De façon générale, la représentation réductible est de la forme

$$D=c_1D^{(1)}\oplus c_2D^{(2)}\oplus c_3D^{(3)}$$

Les 3 classes contiennent respectivement $p_1=1, p_2=3, p_3=2$ éléments et nous avons un nombre de RI égal au nombre de classes, trois. Nous pouvons maintenant calculer combien de fois chaque RI apparaît dans *D*, puisque nous connaissons déjà les $\chi^{(j)}(C_k)$. Utilisant l'expression obtenue pour calculer les coefficients, nous avons, explicitement

$$\begin{aligned}c_1&=\frac{1}{6}\left[p_1\chi^{(1)}(C_1)^*\chi(C_1)+p_2\chi^{(1)}(C_2)^*\chi(C_2)+p_3\chi^{(1)}(C_3)^*\chi(C_3)\right]\\&=\frac{1}{6}\left[1\times1\times3+3\times1\times1+2\times1\times0\right]=\frac{6}{6}=1\end{aligned}$$

et de façon similaire

$$c_2 = \frac{1}{6}\left[1\times 1\times 3 + 3\times(-1)\times 3 + 2\times 1\times 0\right] = 0$$

$$c_3 = \frac{1}{6}\left[1\times 2\times 3 + 3\times 0\times 1 + 2\times 1\times 0\right] = 1$$

et nous avons donc

$$D = 1 \bullet D^{(1)} \oplus 1 \bullet D^{(3)}$$

et de fait, $N_1 = 1$ et $N_2 = 2$, donc $N = N_1 + N_2 = 1 + 2 = 3$, la dimension de notre représentation. Ce n'était pas évident a priori, puisqu'il existe six solutions possibles basées sur les seules dimensions des RI pour construire une représentation à 3 dimensions.

4. Représentation régulière

Pour tout groupe G d'ordre h (h éléments) on peut construire une représentation en matrices h x h appelée la représentation *régulière* à h dimensions. On peut l'obtenir assez simplement en associant à chaque élément $g_i \in G$ un vecteur colonne à h lignes/entrées que nous noterons $|g_i\rangle$ défini comme suit, zéro à chaque entrée/ligne et un à la $i^{\text{ième}}$ entrée

$$|g_i\rangle = \left.\begin{bmatrix} 0 \\ \ldots \\ 1 \\ \ldots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \text{à la } i^{ième} \text{ entrée} \\ \\ \\ \end{matrix}\right\} h \text{ entrées}$$

Nous prenons alors un autre $g_j \in G$ dont la table de multiplication nous dit que $g_j g_i = g_k$. Nous récrivons cette équation comme

$D(g_j)|g_i\rangle = |g_k\rangle$. En répétant cette opération sur tous les g_i du groupe (pour un k donné, nous arrivons à construire la matrice $D(g_j)$ qui représente g_j dans cette représentation régulière.

Illustrons la méthode avec notre fidèle groupe S_3. Il compte 6 éléments, donc h = 6 et nous associons les vecteurs

$$|s_1\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad |s_2\rangle=\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad |s_3\rangle=\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad |s_4\rangle=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\\0\\0\end{bmatrix},\quad |s_5\rangle=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\1\\0\end{bmatrix},\quad |s_6\rangle=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

Parce que l'opération s_1 est l'identité, $D(s_1)$ sera la matrice unité 6x6. Choisissons maintenant s_2 et tirons de la table de multiplication

$s_2s_2 = s_1$, $s_2s_3 = s_6$, $s_2s_4 = s_5$, $s_2s_6 = s_3$

Commençons avec la première de ces équations sous la forme $D(s_2)|s_2\rangle=|s_1\rangle$. Cette opération prend le 1 de la 2^e^ ligne de $|s_2\rangle$ pour le transférer à la 1^ière^ ligne pour donner $|s_1\rangle$. Il faut donc que le terme en (1, 2) (1^ière^ ligne, 2^e^ colonne) de la matrice $D(s_2)$ soit un 1 et que le reste de la colonne soit constitué de zéro, donc

$$D(s_2)=\begin{bmatrix} . & 1 & . & . & . & . \\ . & 0 & . & . & . & . \\ . & 0 & . & . & . & . \\ . & 0 & . & . & . & . \\ . & 0 & . & . & . & . \\ . & 0 & . & . & . & . \end{bmatrix}$$ où les . indiquent que nous ne savons pas encore quoi y mettre. Considérons maintenant la deuxième équation sous la forme $D(s_2)|s_3\rangle=|s_6\rangle$. Cette opération prend le 1 de la 3^e^ ligne de $|s_3\rangle$ pour le transférer à la 6^e^ ligne, ce qui nous donne la recette pour la 3^e^ colonne de $D(s_2)$, des zéro partout, sauf à la 6^e^ ligne où on place un 1, donc

$$D(s_2)=\begin{bmatrix} . & 1 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & 1 & . & . & . \end{bmatrix}.$$

On continue avec s_2 agissant sur s_4, s_5 et s_6, ce qui nous donne

$$D(s_2) = \begin{bmatrix} . & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ . & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ . & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ . & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ . & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ . & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Nous savons que les opérations inverses doivent exister, donc la matrice $D(s_2)$ ne peut pas être singulière. La première colonne se construit donc comme les autres en plaçant le 1à la 2^{e} ligne (qui n'en comptait pas). , donc finalement

$$D(s_2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

On note immédiatement que le caractère de s_2 dans cette représentation est zéro, $\chi(s_2) = 0 \Rightarrow \chi(C_2) = 0$. Il en sera donc de même pour s_3 et s_4 qui font partie de la même classe.

Par la même méthode, on peut obtenir toutes (les 6) matrices qui représentent les éléments du groupe S_3 dans la représentation régulière. On constate que

$$\chi(s_5) = \chi(s_6) = \chi(C_3) = 0$$

Par contre $\chi(C_1) = \chi(s_1) = 6 =$ dimension de la représentation (évidemment !). En fait, ce qui apparaît ici comme un résultat particulier est en fait un résultat général : <u>dans la représentation régulière, le caractère de toutes les classes est nul, sauf celui de la classe triviale (élément identité) qui est égal à la dimension de la représentation.</u>

La représentation régulière D est réductible et sa réduction se fait comme dans la section précédente. Nous écrivons

$$D = c_1 D^{(1)} \oplus c_2 D^{(2)} \oplus c_3 D^{(3)}$$

et nous calculons les coefficients par la formule utilisée plus tôt. Nous obtenons ici (exercice à faire)

$$c_1 = 1, \quad c_2 = 1, \quad c_3 = 2$$

Nous voyons ainsi que toutes les RI apparaissent dans la représentation régulière de S_3 et ceci n'est pas un cas particulier, c'est un résultat général : toutes les RI participent à la représentation régulière. Ici, nous avons

$$D = 1 \bullet D^{(1)} \oplus 1 \bullet D^{(2)} \oplus 2 \bullet D^{(3)} \quad \Rightarrow \quad N = N_1 + N_2 + 2N_3 = 1 + 1 + 2 \times 2 = 6$$

ce qui va de soi et est cohérent avec la règle déjà acceptée

$$\sum_{i=1}^{RI} N_i^2 = h, \quad ici \quad 1^2 + 1^2 + 2^2 = 6 \text{ comme il se doit}$$

5. Signification des différentes représentations : espace de représentation

Dans le seul cadre de notre exemple fétiche, le groupe S_3 (isomorphe au groupe de symétrie du triangle équilatéral), nous avons déjà identifié deux RI à une, une et deux dimensions, sans compter une représentation à trois dimensions et une à six dimensions, toutes deux réductibles. Étant donné que S_3 compte 6 éléments, chacune de ces représentations compte (au plus) 6 matrices *différentes* N x N, N étant la dimension de la représentation. Que signifient toutes ces matrices ?

Rappelons d'abord que les éléments du groupe sont des transformations de symétrie sur un système (physique). Nous pouvons voir qu'une matrice N x N représentant une transformation $g \in G$ peut être vue comme opérant une transformation linéaire sur un *vecteur* qui peut apparaître comme un vecteur colonne à N lignes , noté ici $[x]$, le résultat de la transformation étant le vecteur colonne $[x']$, ce qui se lit

$$[x'] = [g(NxN)][x]$$

Ces vecteurs à N entrées/lignes forment un espace vectoriel ε_N, appelé espace de représentation.

Tout ce qui est demandé aux matrices de la représentation $D(g)$, c'est d'avoir les mêmes propriétés de multiplication et d'associativité que les éléments du groupe sous un homomorphisme $G \sim D(g)$ (la représentation a souvent plus d'éléments que le groupe initial, aux moins pour les groupes finis). Par contre, tout ce qui est demandé aux vecteurs de l'espace ε_N, c'est que ses vecteurs se transforment sous l'application des matrices représentant $g \in G$ et maintenant *réinterprétées* comme des transformations linéaires sur ε_N, alors que les transformations $g \in G$ ne sont soumises à aucune condition de linéarité.

Ces transformations linéaires via les représentations (matricielles) apparaissent donc comme une *traduction/transcription* linéaire de transformations non nécessairement linéaires. Or, il est beaucoup plus simple d'étudier des transformations linéaires que des transformations non linéaires et c'est pourquoi les physiciens, parmi d'autres, *préfèrent* souvent étudier les représentations que les groupes eux-mêmes. Au delà de cette *facilité*, il faut dire que les espaces de représentation ont souvent une signification ou une application en physique.

Il faut noter un résultat important. Dans une RI à *N* dimensions, les matrices *N* x *N*, les $D(g)$, vont transformer les vecteurs de ε_N en d'autres vecteurs de ε_N sans sortir de cet espace vectoriel. Cet espace ε_N est globalement invariant sous les transformations de *G*.

Pour qu'il y ait une signification physique aux vecteurs de ε_N et à une représentation $D(g)$ de dimension *N*, il apparaît essentiel que ces *vecteurs* représentent une certaine description du système physique invariant sous *G*, ou du moins en représentent certaines propriétés, certaines caractéristiques.

Sans démonstration, nous allons utiliser l'exemple du groupe d'invariance du triangle équilatéral que nous savons être isomorphe à S_3 pour illustrer les liens qui peuvent exister entre les RI et certaines propriétés du triangle. Ces RI, nous les avons étudiées plus haut.

a) La représentation $D^{(1)}$ est à une dimension (le nombre 1, noté ici [1]) et tous les éléments de S_3 sont représentées par ce seul nombre. L'espace de représentation compte donc des *vecteurs* à une dimension, disons $|u\rangle$. Toute transformation (linéaire) du groupe sur ce vecteur donne donc

$$|u'\rangle = [1]|u\rangle \equiv |u\rangle ,$$

ce qui laisse le vecteur inchangé sous toutes les transformations du groupe. Une quantité laissée invariante par transformation linéaire s'appelle, en vocabulaire tensoriel un scalaire. Ici, un choix raisonnable de ce scalaire, de cet invariant sous tous les échanges de sommet et de rotations pourrait être la longueur du périmètre du triangle, qui n'est pas affecté du tout par les transformations du groupe, ce qui est évident. Ainsi, *l'état physique* du triangle représenté par ce vecteur $|u\rangle$ est la longueur du périmètre du triangle.

b) La RI $D^{(2)}$ est également à une dimension, mais les éléments I, R_1, R_2 y sont représentés par la matrice [1], alors que les éléments *A, B, C* y sont représentés par la matrice [-1]Les vecteurs de l'espace vectoriel n'ont toujours qu'une seule composante et nous avons les deux possibilités

$$|u'\rangle = [1]|u\rangle \equiv |u\rangle$$
$$|u'\rangle = [-1]|u\rangle \equiv -|u\rangle$$

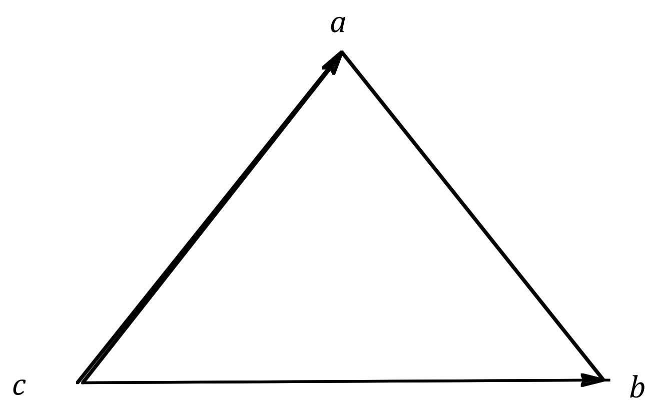
Ici, le vecteur ne change pas en grandeur, mais peut changer de signe. En langage *classique*, on appelle de telles quantités des pseudo-scalaires. Notons ici que les trois transformations qui ne changent pas le signe conservent la séquence des sommets $a \to b \to c$ dans l'ordre horaire, alors que les trois autres changent la séquence qui devient antihoraire. La quantité physique décrite par ce vecteur est donc un périmètre orienté, horaire ou antihoraire.

c) La représentation $D^{(3)}$ est à deux dimensions. Les opérateurs y sont représentés par des matrices 2x2 et les vecteurs (ici vecteurs colonnes) sont du type $\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$ et les vecteurs de base de cet espace peuvent être choisis intelligemment comme $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ *et* $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Nous avons donc la possibilité d'avoir deux vecteurs à 2 composantes linéairement indépendants. Rappelons que nous transformons un triangle plan qui reste dans le plan et que des *objets* à deux composantes peuvent parfaitement être des vecteurs linéairement indépendants dans ce plan. Notons-les $|u\rangle$ et $|v\rangle$.

Il semble être logique de les choisir comme des vecteurs entre deux sommets. Imaginons donc deux vecteurs que nous noterons

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

Nous devons associer ces vecteurs à la réalité géométrique/physique du triangle équilatéral. On peut définir/choisir ces deux vecteurs sur le triangle comme ci-dessous

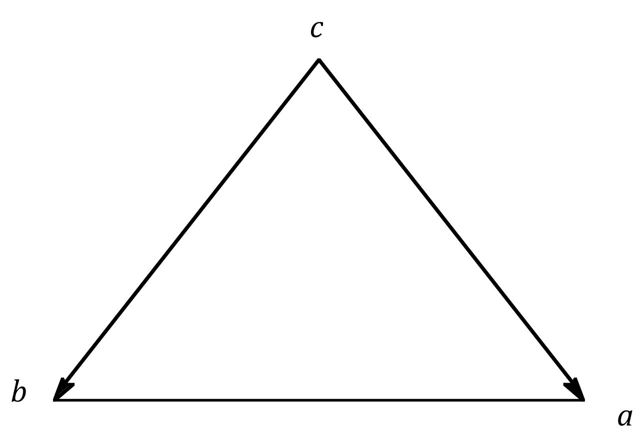


$$|u\rangle \doteq \overrightarrow{ca},$$
$$|v\rangle \doteq \overrightarrow{cb}$$

Ils sont suffisants pour définir complètement le triangle, puisque les trois sommets sont définis. Si nos côtés sont de longueur unité, alors ces deux vecteurs, écrits sous la forme de vecteurs colonnes, sont initialement, selon la figure ci-dessus

$$|u\rangle \to \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$$
$$|v\rangle \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Nous allons examiner l'effet des différentes transformations du groupe sur nos deux vecteurs. Commençons avec R_1 qui fait tourner le triangle de 60˚ dans le sens horaire. Les vecteurs deviennent $|u'\rangle\; et\, |v'\rangle$ qu'on peut voir sur la figure ci-dessous



Il est facile de déterminer par observation que

$$|u'\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$$

$$|v'\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} -1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$$

mais on doit aussi avoir

$$|u'\rangle = D(R_1)|u\rangle \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} 1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$$

$$|v'\rangle = D(R_1)|v\rangle \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} -1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

où $D(R_1) = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ dont les éléments restent à déterminer. Les deux équations matricielles donnent 4 équations algébriques dont la solution nous donne les éléments de $D(R_1)$:

$$\begin{aligned} 1/2 &= a/2 + \sqrt{3}b/2 \\ -\sqrt{3}/2 &= c/2 + \sqrt{3}d/2 \\ -1/2 &= a \\ -\sqrt{3}/2 &= c \end{aligned}$$

dont la solution est $a = -1/2, b = \sqrt{3}/2, c = -\sqrt{3}/2, d = -1/2$, donc

$$D(R_1) = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$

Recommençons avec la transformation *A* qui échange les sommets *b* et *c*. Dans ce cas, nos deux vecteurs $|u'\rangle \, et \, |v'\rangle$ deviennent, par observation

$$|u'\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}, \quad |v'\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ainsi, les deux équations de transformation $|u'\rangle = D(A)|u\rangle, \quad |v'\rangle = D(A)|v\rangle$ donnent sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$où \quad D(A) = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

On obtient facilement directement par algèbre

$$D(A) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

On fait de même pour les autres éléments du groupe et on retrouve identiquement les matrices déjà obtenues en **II.2.d.** Il faut dire qu'un autre choix des vecteurs aurait conduit à des matrices différentes pour représenter les transformation, aurait donc donné une représentation différente, $D'(R_1), D'(A), \ldots$, mais complètement équivalente au sens habituel qu'il existe une matrice non singulière *S* telle que $D' = S^{-1}DS$.

Ici, dans cette représentation à 2 dimensions, les vecteurs décrivent la totalité de la réalité physique du triangle équilatéral.

Ce résultat est général pour les groupes discrets qui sont finis.

III. Groupes continus ou infinis

1. Introduction

Dans l'exemple du triangle équilatéral, nous avons vu que des rotations de 60° et de 120° laissent le triangle inchangé. Supposons, au lieu de nous limiter à un nombre discret de valeurs pour l'angle de rotation, que nous étudions les rotations d'un angle θ quelconque, toute rotation laissant notre système physique invariant. Le groupe ainsi constitué (où l'élément unité correspond à $\theta = 0°$) a autant d'éléments qu'il y a de valeurs d'angle entre 0° et 360° ou entre 0 et 2π rad, un nombre infini. En effet, cet intervalle est un continu qui compte un nombre infini de valeurs d'angle. Ce type de groupe est appelé groupe continu ou infini. Pensez par exemple aux rotations qui laissent une sphère invariante.

Un groupe infini a des éléments qui dépendent d'un ou de plusieurs paramètres variant de façon continue, chacun sur un intervalle donné de valeurs. Notant x_i ces paramètres, un élément du groupe s'écrira

$$g(x_1,x_2,\ldots x_n)=g(x)$$

pour un groupe à *n* paramètres. Puisqu'il s'agit d'un groupe, nous avons

$$g(x_1,x_2,\ldots x_n)g(y_1,y_2,\ldots y_n)=g(z_1,z_2,\ldots z_n)$$

où les *n* paramètres z_i sont fonction des x_j et des y_k, i.e.

$$\begin{aligned}
z_1 &= f_1(x_1,x_2,\ldots x_n,y_1,\ldots y_n)\\
z_2 &= f_2(x_1,x_2,\ldots x_n,y_1,\ldots y_n)\\
&\ldots\ldots\ldots\\
z_n &= f_n(x_1,x_2,\ldots x_n,y_1,\ldots y_n)
\end{aligned}$$

Ces énoncés *remplacent* la table de multiplication des groupes discrets. Les autres propriétés des groupes doivent être satisfaites, en particulier l'associativité qui impose

$$\big(g(x)g(y)\big)g(z)=g(x)\big(g(y)g(x)\big)$$

ou, en d'autres termes

$$\begin{aligned}
&f_i\big(f_1(x_1,\ldots x_n,y_1,\ldots y_n),\ldots f_n(x_1,\ldots x_n,y_1,\ldots y_n),z_1,\ldots z_n\big)=\\
&\quad f_i\big(x_1,\ldots x_n,f_1(y_1,\ldots y_n,z_1,\ldots z_n),\ldots f_n(y_1,\ldots y_n,z_1,\ldots z_n)\big)
\end{aligned}$$

qu'on trouve parfois en notation écourtée

$$f_i\big(f(x,y),z\big)=f_i\big(x,f(y,z)\big)$$

qui doivent rester vrai pout tout *i*. Lorsque les fonctions $f_i(x,y)$ qui définissent le groupe sont continues et définies à tous les ordres (fonctions C^∞), le groupe s'appelle un groupe de Lie (du nom de Sophus Lie).

2. Quelques exemples

a) Le groupe des transformations linéaires du plan. Ici, *x, y* sont les coordonnées d'un point et *a, b, c, d* sont les paramètres de la transformation qui s 'écrit ici

$$\left.\begin{array}{l} x' = ax+by \\ y' = cx+dy \end{array}\right\} \rightarrow \left\{ \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right.$$ le côté droit étant la forme matricielle

pour écrire les équations de cette transformation.

Imaginons une deuxième transformation suivant la première

$$\begin{pmatrix} x'' \\ y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a' & b' \\ c' & d' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a' & b' \\ c' & d' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

où clairement le produit entre les matrices est le produit matriciel ordinaire et comme le produit matriciel ne commute pas en général, alors ce groupe n'est pas abélien. On aura déjà vérifié qu'il s'agit d'un groupe dont les éléments sont des matrices 2x2 non singulières (pour avoir des inverses) et dont l'élément unité est

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$ et où le produit (opération de groupe) est le produit matriciel ordinaire.

Ce groupe est clairement isomorphe au groupe des matrices non singulières 2x2 qui s'appelle *GL(2),* un sous-groupe de *GL(N)* qui décrit les transformations (Générales) linéaires des coordonnées d'un espace à N dimensions et a N^2 paramètres. La dimension du groupe est ici infinie. On note parfois les éléments du groupe $g(a,b,c,d)$

Une variante est le groupe des transformations affines

$$\left.\begin{array}{l} x' = ax+by+e \\ y' = cx+dy+f \end{array}\right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix} \right.$$

b) Les matrices (complexes) unitaires ($A^\dagger = A^{-1}$) N x N et de déterminant = +1 forment un groupe appelé *SU(N)* et ont $N^2 - 1$ paramètres, un de moins que *GL(N)*, à cause de la contrainte que le déterminant est = +1. Ainsi, le groupe *SU*(2*)* a trois paramètres que nous noterons θ, φ et η, et alors un élément de *SU*(2) peut s'écrire

$$g(\theta,\varphi,\eta) = \begin{pmatrix} e^{i\theta}\cos\eta & e^{i\varphi}\sin\eta \\ e^{-i\varphi}\sin\eta & e^{-i\theta}\cos\eta \end{pmatrix}$$

On vérifie qu'effectivement, la transposée conjuguée est l'inverse sous produit matriciel (unitaire) et que l'élément unité est $g(0,0,0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

c) Les matrices réelles orthogonales ($A^T = A^{-1}$) forment aussi un groupe (orthogonal) appelé *O(N)* lorsqu'elles sont *N x N*. Ce groupe compte *N(N-*1*)/*2 paramètres et les matrices ont un déterminant = ± 1 . Lorsque le déterminant est = +1, (cas Spécial) on appelle parfois ce groupe $O^{+}(N)$ ou *SO*(*N*). Ce groupe est important puisque les rotations dans l'espace à 3 dimensions spatiales d'un point de coordonnées (*x, y, z*) sont précisément décrites par de telles matrices. On sait qu'une telle rotation peut se décrire à l'aide de trois angles de rotation p/r à des axes particuliers, comme dans le cas des angles d'Euler. Le groupe a effectivement alors 3(3-1)/2 = 3 paramètres. Ce groupe joue un rôle très important en physique. En effet, les Hamiltoniens des systèmes gravitationnels, atomiques, nucléaires sont généralement invariants sous rotation.

NOTE : On remarque que les exemples discutés ci-haut ont des éléments qui sont des matrices et que ces matrices sont de dimension finie. Cela n'exclura pas de trouver pour ces groupes des représentations matricielles qui seront constituées de matrices, mais dont les dimensions pourront être différentes et même excéder la dimension des éléments (originaux) du groupe.

3. Identité et générateurs

Nous notons $s = \{s_i | i = 1,2,...,n\}$ les paramètres du groupe et nous les définissons de telle sorte que l'élément identité corresponde à $s = 0$, donc $I = g(0)$, ou

$$g(0)g(x) = g(x)$$

Pour chaque paramètre du groupe, nous définissons un <u>générateur</u>. Ce générateur prendra souvent la forme d'un opérateur différentiel responsable de la variation du paramètre par incréments infinitésimaux. Pour les groupes de matrices, il peut aussi prendre la forme d'une matrice. Il faudra spécifier, car leur rôle peut être différent, différentiel ou matriciel. Dans ce qui suit, nous allons supposer que nous avons des groupes de Lie, donc différentiables p/r à leurs paramètres. Ces groupes sont les plus importants en sciences. Appelons X_i le générateur associé au paramètre s_i . Par définition

$$X_1 = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{g(\varepsilon,0,0,...0) - g(0,0,...0)}{\varepsilon}$$
$$X_2 = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{g(0,\varepsilon,0,...0) - g(0,0,...0)}{\varepsilon}$$
....
$$X_n = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{g(0,0,0,...\varepsilon) - g(0,0,...0)}{\varepsilon}$$

pour un groupe à n paramètres.

Prenons pour exemple le groupe des rotations dans le plan, i.e. dans un espace à deux dimensions. Un seul angle, ici noté θ, est suffisant pour décrire toutes les rotations. De fait, ce groupe est isomorphe à $SO(2)$ qui compte 2(2-1)/2 = 1 paramètre ! Nous posons ici que la rotation affecte le système de coordonnées (d'axes) et que **le point *P* reste en place** (la convention inverse est possible, mais mène à des matrices un peu différentes). Ainsi, suite à une rotation d'un angle θ du système d'axes, les coordonnées (x, y) du point P (gardé immobile) deviennent (x', y') qui sont alors données par les équations de transformation données ici sous forme matricielle (à gauche)

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} x' = x\cos\theta + y\sin\theta \\ y' = -x\sin\theta + y\cos\theta \end{cases}$$

On note que le groupe a un seul paramètre, θ et que l'élément unité correspond à $\theta = 0$. Le générateur est défini par

$$X_\theta = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\begin{pmatrix} \cos\varepsilon & \sin\varepsilon \\ -\sin\varepsilon & \cos\varepsilon \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \cos 0 & \sin 0 \\ -\sin 0 & \cos 0 \end{pmatrix}}{\varepsilon}$$

Pour prendre la limite, on se rappelle qu' à ε petit, $\sin\varepsilon \approx \varepsilon$ et $\cos\varepsilon \approx 1 - \varepsilon^2/2$, ce qui donne

$$X_\theta = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} \begin{pmatrix} -\varepsilon/2 & 1 \\ -1 & -\varepsilon/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

qui est l'expression du générateur sous sa forme matricielle.

Voyons maintenant le générateur différentiel : pour un angle θ infinitésimal, les équations de transformation nous donnent

$$x' = x + \theta y$$
$$y' = -\theta x + y$$

On peut aussi faire cette opération en utilisant le générateur (c'est sa définition !)

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \doteq \left(I+\theta X_\theta\right)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \left\{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \theta\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\right\} = \begin{pmatrix} x+\theta y \\ -\theta x + y \end{pmatrix}$$

exactement le même résultat.

Imaginons que nous définissions l'opérateur différentiel

$$\ell_z = -x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x}$$

On vérifie alors facilement que

$$\left(1+\theta\ell_z\right)x = x+\theta y = x'$$
$$\left(1+\theta\ell_z\right)y = y-\theta x = y'$$

Nous avons donc trouvé le générateur sous sa forme d'opérateur différentielle, c'est simplement l'opérateur du moment cinétique (quantique) $\left(\text{sans les facteurs } i \text{ et } \hbar\right)$.

NOTE IMPORTANTE : l'expression pour ℓ_z ci-dessus n'est pas très satisfaisante. En effet, plusieurs auront reconnu que le moment angulaire défini comme $\vec{\ell} = \vec{r}\times\vec{p}$ prend la forme quantique $\vec{\ell}^{op} = -i\hbar\vec{r}\times\nabla$, donc a une composante z donnée par

$$\ell_z^{op} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \xrightarrow{\hbar=1} -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Si on utilise cette forme *quantique* de l'opérateur, alors nous devons écrire, avec $\hbar = 1$

$$x' = \left(1+i\theta\ell_z^{op}\right)x$$
$$y' = \left(1+i\theta\ell_z^{op}\right)y$$

où clairement, x' (y') est donné par un opérateur agissant sur x (y) seulement.

Le rang d'un groupe est le nombre maximal de générateurs qui commutent entre eux.

NOTE IMPORTANTE SUR LES ROTATIONS : ce commentaire s'applique à toutes les rotations. Ci-dessus, nous avons décrit la rotation en faisant tourner le système d'axes d'un angle θ et en gardant le point P immobile. Dans ce cas, les coordonnées du point P dans le nouveau système de référence $\left(x',y'\right)$ sont reliées aux coordonnées $\left(x,y\right)$ dans le système initial par

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} x' = x\cos\theta + y\sin\theta \\ y' = -x\sin\theta + y\cos\theta \end{cases}$$

Géométriquement, cela est équivalent à garder les axes fixes et à faire tourner le point du même angle dans la direction inverse.

4. *SU*(2) : un exemple non trivial

a. Le groupe et ses paramètres

Nous allons présenter *SU*(2) un groupe parmi les plus *simples* des groupes non abéliens et un des plus utiles en physique. Nous l'utiliserons comme cadre pour développer certains concepts comme les représentations irréductibles. Comme son label l'indique, ce groupe est constitué des matrices complexes unitaires à déterminant unité. La forme générale d'un élément est donc

$$g = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad où \quad a,b \in \mathbb{C}$$

et contient donc a priori 4 paramètres réels, mais la contrainte que

$$\left|a^2\right| + \left|b^2\right| \equiv aa^* + bb^* = 1$$

réduit ce nombre à trois, en conformité avec la règle générale que les groupes *SU*(*N*) ont $N^2 - 1 = 3$ ici. Une façon d'expliciter g à l'aide de ces 3 paramètres, que nous noterons θ,φ,η, est d'écrire

$$g(\theta,\varphi,\eta) = \begin{pmatrix} e^{i\theta}\cos\eta & e^{i\varphi}\sin\eta \\ -e^{-i\varphi}\sin\eta & e^{-i\theta}\cos\eta \end{pmatrix}$$

Cette forme satisfait nos conditions et *simplifie* l'écriture de l'élément unité qui est simplement $I = g(0,0,0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

b. Les générateurs matriciels

Par contre, notre choix de paramètres *complique* un peu l'écriture des générateurs. A priori, ces matrices 2x2 de *SU*(2) peuvent être vues comme générant des transformations linéaires de *coordonnées complexes* que nous noterons u_1 et u_2

$$\begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\theta}\cos\eta & e^{i\varphi}\sin\eta \\ -e^{-i\varphi}\sin\eta & e^{-i\theta}\cos\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} u_1' = e^{i\theta}\cos\eta u_1 + e^{i\varphi}\sin\eta u_2 \\ u_2' = -e^{-i\varphi}\sin\eta u_1 + e^{-i\theta}\cos\eta u_2 \end{cases}$$

Le calcul de deux des générateurs matriciels est relativement facile

$$X_\theta = \lim_{x\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left(g(\varepsilon,0,0)-g(0,0,0)\right)$$

$$= \lim_{x\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left(\begin{pmatrix} e^{i\varepsilon} & 0 \\ 0 & e^{-i\varepsilon}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right) = \lim_{x\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left(\begin{pmatrix} 1+i\varepsilon & 0 \\ 0 & 1-i\varepsilon\end{pmatrix}-\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right)$$

$$= \lim_{x\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\begin{pmatrix} i\varepsilon & 0 \\ 0 & -i\varepsilon\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i\end{pmatrix}$$

Aussi directement, on calcule

$$X_\eta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0\end{pmatrix}$$

Le calcul de X_φ pose un problème, parce que φ n'apparaît que sous la combinaison $e^{i\varphi}\sin\eta$ et que prendre $\eta = 0$ fait disparaître toute dépendance en φ. Nous devons donc calculer ce générateur en supposant une valeur petite mais non nulle pour η. Dans ce cas, le calcul du générateur est aussi simple que pour les deux autres et donne

$$X_\varphi = \sin\eta\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0\end{pmatrix}$$

En fait, nous *définirons* le *vrai* générateur comme cette expression divisée par $\sin\eta$, ce qui nous laissera

$$X_\varphi = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0\end{pmatrix}$$

Ces générateurs n'étant que des matrices 2x2, il est trivial de calculer leurs commutateurs

$$\left[X_\theta, X_\eta\right] \doteq X_\theta X_\eta - X_\eta X_\theta = 2X_\varphi$$

$$\left[X_\eta, X_\varphi\right] = X_\eta X_\varphi - X_\varphi X_\eta = 2X_\theta$$

$$\left[X_\varphi, X_\theta\right] = 2X_\eta$$

Ces trois expression forment ce qu'on appelle l'algèbre de Lie de *SU*(2), généralement notée *su*(2) où le commutateur est le *produit* (de Lie). C'est Sophus Lie, un mathématicien norvégien, qui a montré que l'algèbre contenait autant d'information que le groupe lui-même, mais de façon différente.

c. Les générateurs différentiels

Retournons aux équations de transformation

$$u_1' = e^{i\theta}\cos\eta u_1 + e^{i\varphi}\sin\eta u_2$$
$$u_2' = -e^{-i\varphi}\sin\eta u_1 + e^{-i\theta}\cos\eta u_2$$

On définira les générateurs différentiels pour un paramètre/*angle* petit ε . Ces générateurs seront notés χ et seront tels que

$$u_1' = (1+\varepsilon\chi)u_1$$
$$u_2' = (1+\varepsilon\chi)u_2$$

Pour χ_θ , nous avons $\theta = \varepsilon, \varphi = 0, \eta = 0$ et les équations de transformation deviennent

$$u_1' = e^{i\varepsilon}u_1 + 0u_2 \simeq (1+i\varepsilon)u_1$$
$$u_2' = -0u_1 + e^{-i\varepsilon}u_2 \simeq (1-i\varepsilon)u_2$$

Ces transformations *suggèrent* de vérifier que l'opérateur χ_θ peut être identifié à

$$\chi_\theta = i\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_1} - u_2\frac{\partial}{\partial u_2}\right)$$

ce qui se vérifie facilement.

De façon tout-à-fait similaire, on détermine

$$\chi_\eta = \left(u_2\frac{\partial}{\partial u_1} - u_1\frac{\partial}{\partial u_2}\right)$$

et $\chi_\varphi = i\left(u_2\frac{\partial}{\partial u_1} + u_1\frac{\partial}{\partial u_2}\right)$ où il fallait faire comme pour le générateur matriciel.

Note : Pour calculer les commutateurs et établir l'algèbre de Lie des générateurs différentiels, on présume que ces commutateurs d'opérateurs différentiels s'appliquent à une fonction $f(u_1,u_2)$ quelconque et on obtient

$$[\chi_\theta,\chi_\eta]f \doteq \chi_\theta\chi_\eta f - \chi_\eta\chi_\theta f = -2\chi_\varphi f \Rightarrow [\chi_\theta,\chi_\eta] = -2\chi_\varphi$$

et de la même façon

$$[\chi_\eta,\chi_\varphi] = -2\chi_\theta$$
$$[\chi_\varphi,\chi_\theta] = -2\chi_\eta$$

Ces relations diffèrent de celles des générateurs matriciels par le signe – pour chaque commutateur. Ce résultat est général et traduit une différence fondamentale entre les deux types de générateurs. Les générateurs matriciels agissent sur les *coordonnées* u_1 *et* u_2, alors que les générateurs différentiels agissent sur des fonctions de ces *coordonnées* $f(u_1,u_2)$. Ainsi, pour une transformation infinitésimale, $\theta=\varepsilon, \varphi=0, \eta=0$

$$\begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix} = (I+\varepsilon X_\theta)\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i\varepsilon & 0 \\ 0 & -i\varepsilon \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+i\varepsilon)u_1 \\ (1-i\varepsilon)u_2 \end{pmatrix}$$

alors que nous avons

$$f'(u_1,u_2) = (1+\varepsilon\chi_\theta) f(u_1,u_2) = f(u_1,u_2) + i\varepsilon u_1 \frac{\partial f(u_1,u_2)}{\partial u_1} - i\varepsilon u_2 \frac{\partial f(u_1,u_2)}{\partial u_2}$$

5. <u>Transformation de fonction vs de coordonnées</u>

Pour mieux comprendre rapidement la différence dont il est question, considérons les deux situations suivantes : La rotation de coordonnées d'un angle θ et la rotation d'un vecteur, i.e. d'une *fonction* des coordonnées également d'un angle θ.

Les coordonnées d'un point *P*, lorsque les axes de coordonnées sont tournés, deviennent

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

alors que les *composantes* du vecteur $\overrightarrow{OP}$ tourné deviennent

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Il est clair que les deux matrices sont l'inverse l'une de l'autre. C'est cet effet qui est responsable du signe – qui différencie les générateurs matriciels des générateurs différentiels.

Posons maintenant que $x=\{x_1,x_2,...,x_n\}$ représente un ensemble de coordonnées et introduisons une transformation arbitraire sur les coordonnées, notée *R* qui donne

$$x' = Rx$$

qui n'est pas nécessairement linéaire. Nous définissons une transformation O_R qui agit sur les fonctions de *x* de telle sorte que

$O_R f(x) = f(Rx) = f(x') =$ valeur de la fonction *f* évaluée au point Rx. Ayant posé cette définition, on se convainc alors que l'application successive de deux transformations donnera

$$O_S O_R f(x) = f(RSx) \neq f(SRx),$$

parce que nous *savons* que la transformation des coordonnées et celle d'une fonction sont l'inverse l'une de l'autre et que l'inverse de $O_S O_R$ est $O_R^{-1} O_S^{-1}$ où apparaît très clairement l'inversion $R \leftrightarrow S$.

6. <u>Représentations irréductibles de *SU*(2)</u>

Les éléments de *SU*(2) étant des matrices 2x2, elles peuvent être vues comme opérant des transformations sur des *coordonnées complexes* que nous noterons u_1, u_2. Ces transformations sont linéaires.

La notion de *représentation* et plus particulièrement de *représentation irréductible* peut être difficile à saisir. On doit d'abord dire qu'une représentation ne représente pas le groupe au sens premier du terme, pas du tout. Une représentation irréductible est un ensemble/espace de fonctions de u_1, u_2 qui se transforment entre elles sous l'effet des transformations du groupe. Comme les transformations sont linéaires, on voit et vérifie rapidement qu'on peut construire cet espace, qu'on note E_N, à l'aide des fonctions du type

$$u_1^n u_2^m \quad \text{où} \quad n + m = N.$$

On vérifie en effet que sous l'effet de la transformation, un tel terme devient

$$u_1'^n u_2'^m = \left[\left(e^{i\theta} \cos\eta u_1 + e^{i\varphi} \sin\eta u_2 \right)^n \left(-e^{-i\varphi} \sin\eta u_1 + e^{-i\theta} \cos\eta u_2 \right)^m \right]$$

Tous les termes du développement à droite sont du type $u_1^{n'} u_2^{m'}$ en *u* où $n' + m' = N$. On voit bien qu'on ne *sort pas* de notre espace E_N. Cet ensemble/espace de fonctions forme une représentation irréductible du groupe. Sa dimension est le nombre de fonctions différentes qu'il contient, qui est ici égal à (N + 1), comme nous le dit clairement le tableau ci-dessous :

N	Fonctions	E_N	$N+1$
…………	…………	…………	…………
0	1	E_0	1
1	u_1, u_2	E_1	2

2	u_1^2, u_1u_2, u_2^2	E_2	3
3	$u_1^3, u_1^2u_2, u_1u_2^2, u_2^3$	E_3	4

etc.

Il peut être utile d'écrire les éléments d'une représentation irréductible comme un vecteur colonne à $N+1$ lignes. Par exemple, pour $N = 2$, nous aurons $\begin{pmatrix} u_1^2 \\ u_1u_2 \\ u_2^2 \end{pmatrix}$. Ceci nous amène *naturellement* à vouloir écrire (représenter) les transformations de ces fonctions, sous l'effet d'une transformation g du groupe sur les coordonnées u_1, u_2, sous une forme matricielle

$D^{(3)}(g)\begin{pmatrix} u_1^2 \\ u_1u_2 \\ u_2^2 \end{pmatrix}$ où $D^{(3)}$ est une matrice 3x3, 3 étant la dimension de cette représentation irréductible. L'utilisation du symbole D pour noter une telle matrice est assez universelle.

La représentation irr. $N = 0$ est la représentation triviale ou scalaire (elle ne change pas du tout) et clairement $D^{(0)}(g) = 1$, la matrice 1x1 d'élément 1 !!!

La représentation $N = 1$ contient les fonctions u_1, u_2, ou sous la forme matricielle $\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$ qui est précisément notre espace de coordonnées initial sur lequel les transformations g du groupe agissent directement et ainsi $D^{(1)}(g) = g$.

Puisque les *coordonnées* u_1, u_2 sont complexes, on pourrait penser qu'en plus de E_1 qui contient précisément u_1, u_2, on aurait pu avoir E_1^* d'éléments u_1^*, u_2^*, mais sans le démontrer ici (c'est assez difficile) dans le cas de $SU(2)$, ces représentations conjuguées ne sont pas indépendantes des représentations initiales et n'ont pas à être introduites. Ce résultat n'est pas général, par exemple certaines représentations conjuguées de $SU(3)$ sont différentes et doivent être ajoutées.

Le cas $N = 2$ est le premier cas moins *facile*, mais nous le développerons, afin d'illustrer le cheminement possible. Dans le cas $N = 1$, nous savons que

$$\begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix} = D^{(1)}(g)\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \equiv g\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \text{ puisque } D^{(1)}(g) = g.$$

Pour $N = 2$, nous aurons donc

$$\begin{pmatrix} u_1'^2 \\ u_1'u_2' \\ u_2'^2 \end{pmatrix} = D^{(2)}(g)\begin{pmatrix} u_1^2 \\ u_1u_2 \\ u_2^2 \end{pmatrix} \equiv \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ h & j & k \end{bmatrix}\begin{pmatrix} u_1^2 \\ u_1u_2 \\ u_2^2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} u_1'^2 = au_1^2 + bu_1u_2 + cu_2^2 \\ u_1'u_2' = du_1^2 + eu_1u_2 + fu_2^2 \\ u_2'^2 = hu_1^2 + ju_1u_2 + ku_2^2 \end{cases}$$

À l'aide des équations originales de transformation

$$u_1' = e^{i\theta}\cos\eta u_1 + e^{i\varphi}\sin\eta u_2$$
$$u_2' = -e^{-i\varphi}\sin\eta u_1 + e^{-i\theta}\cos\eta u_2$$

nous pouvons calculer directement

$$u_1'^2 = e^{2i\theta}\cos^2\eta u_1^2 + 2e^{i(\theta+\varphi)}\cos\eta\sin\eta u_1u_2 + e^{2i\varphi}\sin^2\eta u_2^2$$

ce qui permet d'identifier directement

$$a = e^{2i\theta}\cos^2\eta, \quad b = 2e^{i(\theta+\varphi)}\cos\eta\sin\eta, \quad c = e^{2i\varphi}\sin^2\eta$$

On arrive a identifier les autres éléments de $D^{(2)}(g)$ en calculant explicitement $u_1'u_2'$ et $u_2'^2$, ce qui nous permet d'écrire

$$D^{(2)}(g) = \begin{pmatrix} e^{2i\theta}\cos^2\eta & 2e^{i(\theta+\varphi)}\cos\eta\sin\eta & e^{2i\varphi}\sin^2\eta \\ -e^{i(\theta-\varphi)}\cos\eta\sin\eta & \cos^2\eta - \sin^2\eta & e^{-i(\theta-\varphi)}\cos\eta\sin\eta \\ e^{-2i\varphi}\sin^2\eta & -2e^{-i(\theta+\varphi)}\sin\eta\cos\eta & e^{-2i\theta}\cos^2\eta \end{pmatrix}$$

A priori, nous ne reconnaissons rien de nos transformations originales dans de telles expressions, mais le chemin pour les obtenir est clair.

7. Introduction à $O^+(3) = SO(3)$

a. Description et matrice de rotation

C'est le groupe des matrices 3x3 orthogonales de déterminant = +1, d'où le nom de Spécial et la nomenclature $SO(3)$. On peut voir ces matrices comme opérant des transformations linéaires sur un système de 3 axes de coordonnées réelles, disons O, x_1, x_2, x_3. Ce groupe a toutes les propriétés pour décrire les rotations dans l'espace d'un système cartésien d'axes *Oxyz* et les 3 paramètres du groupe peuvent représenter les 3 angles d'Euler décrivant cette rotation. En fait, le groupe est réel, comme nos coordonnées cartésiennes et le déterminant = +1, garantit que ces rotations ne vont pas affecter les longueurs, précisément ce que nous cherchons.

On peut utiliser la notation de Wikipedia pour les rotations *intrinsèques/classiques*, i.e. où on tourne les axes selon la règle décrite et illustrée à http://en.wikipedia.org/wiki/Euler_angles. Ici, on débute avec un référentiel (inertiel) fixé dans le laboratoire, disons O, x_1, x_2, x_3 et trois rotations p/r à 3 axes nous amènent à un système dans toute autre orientation (arbitraire) définie par trois nouveaux axes O, x_1', x_2', x_3' qui pourraient être les axes principaux d'un solide (patatoïde) dont nous voulons étudier la rotation dans l'espace.

La façon la plus fréquente (classique) d'opérer les 3 rotations d'un système cartésien 123 (*x, y, z*), nous utilisons une suite de 3 rotations p/r à des axes identifiés. Plusieurs (6) conventions existent pour les définir, ou plutôt pour choisir les trois axes p/r auxquels les 3 rotations seront effectuées. Une façon assez populaire en mécanique classique du corps rigide fait d'abord une rotation d'un angle α p/r à l'axe 3, générant des axes 1'2', suivie d'une rotation d'un angle β autour de 1' (aussi appelé axe N), générant des axes 2'', et 3' et terminant avec une rotation d'un angle γ autour de 3'. Une telle rotation est dite *intrinsèque*, parce qu'elle implique des rotations p/r à des axes autres que les axes initiaux
(O, x_1, x_2, x_3). À toute séquence de 3 rotations intrinsèques, on peut faire correspondre une séquence de 3 rotations *extrinsèques* p/r à des axes fixes, par exemple O, x_1, x_2, x_3, mais en inversant l'ordre des angles. Ici, nous aurions des rotations p/r aux axes *z, x* et *z*.

Dans toutes les conventions, une rotation *R* du système d'axes générera un nouveau système d'axes que nous noterons au final x_1', x_2', x_3' et qui prend la forme matricielle

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

Nous n'utiliserons pas ici cette convention pour plusieurs raisons. Notons par exemple que si l'angle intermédiaire (β) est nul, les deux rotations restantes sont toutes deux autour de Oz. Nous effectuerons plutôt 3 rotations p/r aux 3 axes initiaux qui vont continuer à servir de référence, comme ce serait le cas si c'est le point qui *tourne*. Ceci a l'avantage de conserver le système initial d'axes, ce qui sera intéressant pour les utilisations en mécanique quantique où il est pratique de définir les opérateurs de moment angulaire p/r à des axes bien définis, qui seront ici les axes initiaux fixes (*Ox, Oy, Oz)*. De plus, cette convention rend plus facile le calcul des générateurs matriciels. Nous opérerons donc une rotation d'un angle ψ p/r à l'axe *Oz* suivie d'une rotation d'un angle θ p/r à l'axe *Oy*, pour finir avec une rotation d'un angle ϕ p/r à l'axe *Ox*. Le tout est noté

$$R(\phi,\theta,\psi) = R_x(\phi) R_y(\theta) R_z(\psi)$$

On voit que l'ordre des opérations est comme décrit et il est important de le respecter, parce que les rotations en 3D ne peuvent pas être interverties sans changer le résultat. Ici, la matrice *R* résultant des 3 rotations sur des coordonnées cartésiennes est (c signifie cos et s sin, les 3 nombres sont les 3 angles dans l'ordre)

$$R(\phi,\theta,\psi) = \begin{bmatrix} c2c3 & -c2s3 & s2 \\ c1s3 + c3s1s2 & c1c3 - s1s2s3 & -c2s1 \\ s1s3 - c1c3s2 & c3s1 + c1s2s3 & c1c2 \end{bmatrix}$$

b. Les générateurs matriciels

Les 3 générateurs matriciels sont faciles à évaluer par la méthode habituelle :

$$X_\theta : \quad \theta = \varepsilon, \phi = 0 = \psi$$

$$X_\theta = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} \left\{ \begin{bmatrix} c\varepsilon & 0 & s\varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -s\varepsilon & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right\}$$

$$= \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} \begin{bmatrix} 1-1 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1-1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1-1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Il est tout aussi simple de calculer les deux autres générateurs

$$X_\psi = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$X_\varphi = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

On vérifie directement que

$$\left[X_\phi, X_\theta\right] = -X_\psi$$
$$\left[X_\theta, X_\psi\right] = -X_\phi$$
$$\left[X_\psi, X_\phi\right] = -X_\theta$$

définissant une algèbre de Lie où le produit est le commutateur. Ici donc, X_ψ est le générateur des rotations infinitésimales autour de l'axe *Ox*, X_ψ génère les rotations autour de *Oy* et X_ϕ les rotations autour de *Oz*, qui sont tous des axes fixes (dans le laboratoire).

c. Les générateurs différentiels : $\ell_{x,y,z}$

Nous avons ici trois rotations indépendantes, chacune p/r à un axe cartésien initial fixe bien identifié. Nous avons vu à la section **3.** qu'une rotation d'un angle infinitésimal ϕ autour de l'axe *Oz* laisse *z* inchangé et change les coordonnées *x* et *y* en (on a changé le nom des angles, mais ça n'a aucune importance, nous cherchons uniquement à déterminer la forme différentielle des générateurs)

$$x' = \left(1 + i\phi \ell_z^{op}\right) x$$
$$y' = \left(1 + i\phi \ell_z^{op}\right) y$$

Nous aurons ainsi, pour une rotation infinitésimale de ψ autour de *Ox*

$$y' = \left(1 + i\psi \ell_x^{op}\right) y$$
$$z' = \left(1 + i\psi \ell_x^{op}\right) z$$

et pour une rotation infinitésimale de θ autour de *Oy*

$$z' = \left(1 + i\theta \ell_y^{op}\right) z$$
$$x' = \left(1 + i\theta \ell_y^{op}\right) x$$

Nous avions identifié en **3.** que

$$\ell_z^{op} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \xrightarrow{\hbar=1} -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Il est simple d'identifier par *mutation cyclique* des variables, que

$$\ell_x^{op} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \xrightarrow{\hbar=1} -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\ell_y^{op} = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \xrightarrow{\hbar=1} -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

Nous avons donc une relation entre X_ψ et $i\ell_x^{op}$, une autre entre X_θ et $i\ell_y^{op}$ et entre X_ϕ et $i\ell_z^{op}$.

Nous calculons donc les commutateurs entre les générateurs différentiels

$$\left[i\ell_x^{op}, i\ell_y^{op}\right] = -\left[\ell_x^{op}, \ell_y^{op}\right] = -i\ell_z^{op}$$

$$\left[i\ell_y^{op}, i\ell_z^{op}\right] = -\left[\ell_y^{op}, \ell_z^{op}\right] = -i\ell_x^{op}$$

$$\left[i\ell_z^{op}, i\ell_x^{op}\right] = -\left[\ell_z^{op}, \ell_x^{op}\right] = -i\ell_y^{op}$$

donc

$$\left[\ell_x^{op}, \ell_y^{op}\right] = \ell_z^{op}$$

$$\left[\ell_y^{op}, \ell_z^{op}\right] = \ell_x^{op}$$

$$\left[\ell_z^{op}, \ell_x^{op}\right] = \ell_y^{op}$$

Ici encore nous avons des résultats similaires, mais de signe opposé à ceux des générateurs matriciels, comme il se doit. Le commutateur est parfois appelé produit de Lie et nos générateurs forment une algèbre sous ce produit que nous notons *so(3)*.

d. Les représentations irréductibles de *SO*(3)

Nos matrices initiales sont 3x3 et agissent sur le triplet (x_1, x_2, x_3) que nous retrouvons comme les trois lignes d'un vecteur colonne. Encore une fois, la linéarité de la transformation garantit qu'un terme du type $x_1^n x_2^m x_3^p$ sera transformé en une série de termes du type $x_1^{n'} x_2^{m'} x_3^{p'}$ où $n' + m' + p' = n + m + p = L$. Nous aurons donc *naïvement* la situation suivante pour les représentations irréductibles notées ε_L

L	Fonctions dans ε_L	Nombre de fonctions
0	1	1
1	*x*, *y*, *z*	3
2	*xx*, *xy*, *xz*, *yx*, *yy*, *yz*, *zx*, *zy*, *zz*	9
3	*xxx*, ……,*zzz*	27
	etc	

Déjà au niveau $L = 2$, des corrections s'imposent. Clairement, il n'y a pas 9 fonctions indépendantes, mais 6 parce que (*xy = yx, …*). On peut ne garder que les seules *xx*, *xy*, *xz*, *yy*, *yz*, *zz* par exemple. On pourrait les noter, en notation contravariante (où l'indice est supérieur, $x^\mu = \{x,y,z|\mu=1,2,3\}$), ce qui donne $x^1x^1, x^1x^2, x^1x^3, x^2x^2, x^2x^3, x^3x^3$. On voit que ce sont les éléments du tenseur du 2e ordre $Q^{\mu\nu} = x^\mu x^\nu$ qui est symétrique et contient 6 composantes indépendantes seulement parce que nous avons les 3 relations $x^1x^2 = x^2x^1$, $x^1x^3 = x^3x^1$ et $x^2x^3 = x^3x^2$. Il y a ici un fait additionnel : les transformations de $SO(3)$ sont orthogonales et, de ce fait, elles ne changent pas les *longueurs*, ce qui signifie que la *quantité* $x^1x^1 + x^2x^2 + x^3x^3 = \tau = \text{constante}$. Elle se transforme donc en elle-même et est donc du type $L = 0$ et donc un scalaire (vrai), mais cette relation ne nous laisse plus que 5 composantes linéairement indépendantes pour constituer la représentation irréductible $L = 2$ de $SO(3)$. Ces 5 composantes sont donc les composantes de la représentation irréductibles du 2e ordre sous $SO(3)$. Cette représentation est donc à 5 dimensions = $(2L + 1)$ où ici $L = 2$.

Nous pouvons reprendre le même chemin en partant d'un tenseur cartésien du 3e ordre, mais ça devient plus lourd et il ne nous restera pour le tenseur irréductible du 3e ordre sous $SO(3)$ que 7 composantes linéairement indépendantes = $(2L + 1)$ avec $L = 3$.

Ce sera la règle à partir de maintenant, les représentations irréductibles du $L^{ième}$ ordre sous $SO(3)$ auront $(2L + 1)$ composantes, i.e. auront $(2L + 1)$ dimensions.

Cette règle nous rappelle rapidement une similarité avec les harmoniques sphériques $Y_{LM}(\vartheta,\varphi)$. Ici, l est un entier positif, $l = 0, 1, 2, 3,…$ et il est habituel de compter les composantes, pour une valeur de l, à l'aide de l'indice m qui est un entier courant sur les

$(2l + 1)$ valeurs entières de $m = -l$ jusqu'à $m = +l$. Il est évidemment trivial de dire que r, r^2, r^3,… sont des scalaires, puisque τ l'est et nous allons étudier de plus près

L	ε_L (rep. irr.)	$r^L Y_{LM}(\theta,\varphi)$
0	1	$r^0 Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$
1	x, y, z	$r^1 Y_{11} = -3(x+iy)/\sqrt{8\pi}$
		$r^1 Y_{1-1} = 3(x-iy)/\sqrt{8\pi}$
		$r^1 Y_{10} = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}z$

On constate que les $r^L Y_{LM}(\vartheta,\varphi)$ reproduisent exactement, à des facteurs purement numériques près, les éléments de nos deux premières représentations irr. On peut vérifier qu'il en va de même pour toutes les valeurs de L. Comme le facteur r^L est un scalaire (invariant) sous transformation $SO(3)$, seul l'harmonique sphérique est transformé, donc seuls les angles sont affectés par une transformation $SO(3)$, ces transformations sont donc des rotations en 3-D. Si R est une de ces transformations, faisant passer de (ϑ,φ) à (ϑ',φ'), alors nous aurons

$$Y_{LM'}(\vartheta',\varphi') = \sum_{M=-L}^{M=+L} D^{(L)}_{MM'}(R) Y_{LM}(\vartheta,\varphi)$$

Ici les coefficients $D^{(L)}_{MM'}(R)$ forment une matrice qui est la matrice de rotation lorsqu'on utilise les harmoniques sphériques pour exprimer la représentation irréductible L. Clairement les harmoniques sphériques pour UN L donné se transforment entre eux (une seule valeur de L) sous rotation.

Plus tard, il sera utile de savoir que les fonctions d'un tel ensemble (une représentation irréductible ici) ne peuvent être simultanément fonctions propres que d'opérateurs qui commutent entre eux. Ce n'est clairement pas le cas de nos trois générateurs ! Cependant, nous vérifions facilement que l'opérateur $\vec{l}^{\,2} = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$ commute avec les trois générateurs $\{l_x, l_y, l_z\}$. On peut donc avoir deux opérateurs qui commutent entre eux, par exemple $\vec{l}^{\,2}$ et l_z, qui est précisément le choix qui a été fait dans les représentations irréductibles sous la forme d'harmoniques sphériques, puisqu'on vérifie que

$$\vec{l}^{\,2} Y_{LM} = L(L+1) Y_{LM}$$
$$l_z Y_{LM} = M Y_{LM}$$

On peut démontrer (nous ne le ferons pas) que $\vec{l}^{\,2}$ est le seul opérateur linéairement indépendant dans *SO*(3) qui commute avec les trois générateurs du groupe. Tout autre choix serait une fonction de $\vec{l}^{\,2}$.

9. Transformations finies et exponentiation

Reprenons l'exemple de la section **3.** du présent chapitre où on fait une rotation d'un angle ϕ petit p/r à l'axe *Oz*, donc dans le plan *xOy*. Le groupe est ici *SO*(2) et les nouvelles coordonnées du point, suite à la rotation sont

$$x' = (1 + i\phi\ell_z)x$$
$$y' = (1 + i\phi\ell_z)y$$

où $\ell_z = i\left(x\frac{\partial}{y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ est le générateur différentiel, un opérateur différentiel hermitien, ce qui est toujours le cas pour les groupes de Lie. De façon générale, nous pouvons écrire

$$f(x', y') = (1 + i\phi\ell_z) f(x, y)$$

Supposons maintenant que nous voulions un angle ϕ fini. Les formules ci-dessus ne pourraient s'appliquer qu'à un angle petit défini comme ϕ / N où *N* est grand. Dans ce cas, nous pouvons écrire

$$f(x', y') = (1 + i\phi / N\ell_z) f(x, y)$$

pour une rotation infinitésimale. Si nous voulons faire la pleine rotation de l'angle ϕ fini, alors nous devons faire cette opération *N* fois et pour cet angle fini complet, nous aurons

$$f(x', y') = (1 + i\phi / N\ell_z)^N f(x, y)$$

Dans la limite où $N \to \infty$, cela donne

$$f(x', y') = e^{i\phi\ell_z} f(x, y)$$

C'est ce qu'on appelle l'exponentiation des opérations, une opération fréquente en mécanique quantique par exemple. Le rôle du générateur différentiel y apparaît clairement. Parce que ℓ_z est hermitien, $e^{i\phi\ell_z}$ est clairement unitaire.

10. **<u>Relation entre *SU*(2) et *SO*(3)</u>**

À la section **7.** , nous avons identifié un isomorphisme entre les générateurs de *SO*(3) et *SU*(2) lorsque les générateurs de ce dernier étaient <u>divisés par deux</u>. Ceci indique un homomorphisme entre les deux groupes. Les conséquences sont importantes. D'abord, les deux groupes auront des représentations en commun, mais *SU*(2) aura des représentations qui lui sont propres. Commençons par les représentations communes

SO(3) Valeur de L	*SU*(2) Valeur de N	Dimension	Nom
0	0	1	Scalaire (tenseur d'ordre 0)
1	2	3	vecteur (tenseur d'ordre 1)
2	4	5	tenseur d'ordre 2

etc…

Les noms scalaire, vecteur…doivent être entendus <u>sous rotation</u> et <u>non pas sous transformation générale</u>.

Pour les deux premiers, aucune différence entre rotations et transformations générales et nous avons vu pourquoi. À partir de 2^{e} ordre, la relative *simplicité* de la rotation comme transformation fait que ses tenseurs du 2 ordre n'ont que 5 composantes puis 7, puis…($2L + 1$), là où les transformations générales ont 3^L composantes. On voit dans le tableau que nous faisons la liste de toutes les rep.irr. de *SO*(3), mais pas de toutes les rep. irr. de *SU*(2), puisque nous nous en tenons qu'aux rep.irr. correspondant à $N = 2L$ et nous savons que $L = 0, 1, 2, 3, 4…$, donc nous ne considérons pour *SU*(2) que les représentations $N = 0, 2, 4, 6,…$ Pour l'instant, nous avons laissé de côté les représentations $N = 1, 3, 5…$, mais elles sont destinées à jouer un rôle physique intéressant dans la description du spin (intrinsèque) des particules quantiques.

11. **<u>Interprétation physique</u>**

Avant d'aller plus loin mathématiquement, voyons l'utilité et l'utilisation possible de ces concepts en physique. Leur intérêt se manifeste d'abord en mécanique quantique, non relativiste d'abord. Prenons par exemple le Hamiltonien de l'atome d'hydrogène

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}$$

Cet exemple très simple possède une propriété importante et beaucoup plus générale que l'atome de H. Il décrit un système physique invariant sous rotation, i.e. dont l'orientation spatiale n'affecte pas la forme des lois physiques qui le décrivent. La physique et ses lois sont les mêmes en Australie, en Europe, en Amérique…sur la Lune… ! Mathématiquement, cela se manifeste par le fait que le commutateur entre *H* et l'opérateur moment cinétique orbital $\vec{\ell}$ commute

$$\left[H, \vec{\ell}\right] = 0$$

où les trois composantes $\vec{\ell} = \left(\ell_x, \ell_y, \ell_z\right)$ sont les trois générateurs de *SO*(3). La suite mathématique est que la solution de l'équation de Schrödinger

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

peut s'écrire immédiatement, utilisant les coordonnées sphériques, comme

$$\psi(\vec{r}) = f_{nL}(r)Y_{LM}(\vartheta,\varphi)$$

où les fonctions $Y_{LM}(\vartheta,\varphi)$ appartiennent à l'espace de représentation irréductible (sous rotation) ε_L du groupe *SO*(3) dont les opérateurs $\vec{\ell} = \left(\ell_x, \ell_y, \ell_z\right)$ sont les générateurs. On sait de plus que les labels *L, M*, sont reliés aux mesures de $\vec{\ell}^2$ et de ℓ_z

$$\vec{\ell}^2 Y_{LM}(\vartheta,\varphi) = \hbar^2 L(L+1)Y_{LM}(\vartheta,\varphi)$$
$$\ell_z Y_{LM}(\vartheta,\varphi) = \hbar M Y_{LM}(\vartheta,\varphi)$$

L'invariance du système physique sous rotation, décrite par $\left[H, \vec{\ell}\right] = 0$

a donc des conséquences importantes et simplifie beaucoup notre tâche de description. Ces deux indices/labels jouent un rôle important dans la nomenclature des états atomiques et nucléaires. Il ne reste plus qu'à résoudre une équation pour la fonction $f_{nL}(r)$.

On voit que *L* est associé à la mesure du moment cinétique orbital, et que *M* est associé à la mesure de la composante *z* de cette même quantité, puisque

$$\left|\vec{\ell}\right| = \hbar\sqrt{L(L+1)}, \quad L = 0,1,2,3,4...$$
$$\ell_z = \hbar M, \quad M = -L,-L+1,-L+2,...,L-1,L$$

Ainsi, des labels pour noter les représentations irr. du groupe de transformations qui laissent le système physique inchangé, se retrouvent être les nombres quantiques qui caractérisent les états de ce système. Il est évidemment intéressant de constater alors qu'en mécanique quantique, le moment cinétique orbital est toujours quantifié discret

12. Suite de *SU*(2) vs *SO*(3)

Nous avons permis ci-dessus toutes les représentations irr. de *SO*(3), mais n'avons pas permis toutes celles de *SU*(2). Les représentations irr. de *SO*(3) sont identifiées par le label L = 0, 1, 2, 3, 4, 5…, alors que celles de *SU*(2) le sont par le label N = 0, 1, 2, 3, 4, 5…, mais un facteur ½ apparaît entre L et N où $L = N/2$, donc seules les valeurs de N = 0, 2, 4, 6… sont tenues en compte jusqu'ici et on peut poser la question si les rep. irr. N = 1, 3, 5… ont une signification physique parce qu'elles correspondraient à un moment cinétique de valeur demi-entières

$$J = 1/2, 3/2, 5/2...$$

qui s'ajouteraient aux valeurs entières

$$J = L = 0,1,2,3,4...$$

Dès les débuts de la mécanique quantique on s'est rendu compte expérimentalement que les valeurs ½ entières étaient non seulement possibles mais requises pour décrire les caractéristiques de certaines particules, en particulier les électrons et les protons. Puisque cette propriété est de la nature du moment cinétique, on l'a associé à un moment cinétique intrinsèque, purement quantique et on l'a appelé spin S. Le spin n'apparaît pas de lui-même dans l'équation de Schrödinger, alors que le moment cinétique orbital y apparaît de lui-même. Pour avoir une mécanique où le spin apparaît de lui-même, il faut passer à la mécanique quantique relativiste de Dirac. Il est intéressant de voir qu'il ne semble rien y avoir de relativiste dans *SU*(2) qui *permet* le spin tout naturellement.

Une particule quantique peut donc avoir deux types différents de moment cinétique : orbital décrit par l'opérateur $\vec{\ell}$ et intrinsèque (spin) décrit par un opérateur que nous baptisons $\vec{s}$, auquel cas nous pourrons parler du moment cinétique total décrit par un opérateur $\vec{j}$

$$\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s}$$

La suite est une autre histoire et nous reprendrons l'étude de représentations irréductibles et de leur utilisation en physique (quantique) dans un prochain tutoriel,