Mathématiques Quantiques Discrètes

Didier Robert
Facultés des Sciences et Techniques
Laboratoire de Mathématiques Jean Leray, Université de Nantes
email: didier.robert@univ-nantes.fr

Introduction

Commençons par expliquer le titre.
"quantique" fait référence à la théorie physique appelée "mécanique quantique" qui modélise les propriétés des systèmes de particules de matière à l'échelle atomique et en dessous (tailles d'ordre de l'Angström, $10^{-10}m = 1A$).
"discret" est ici à mettre en opposition à "continu". Une structure discrète est une structure composée d'éléments isolés les uns des autres, comme par exemple les mailles d'un réseau. Une structure continue est composée d'une distribution de matière qui varie "continument" d'un point à un autre de la structure.

L'état d'un système peut être caractérisé par un nombre fini ou infini de paramètres. Un point dans l'espace est repéré par ses trois coordonnées, un système de 3 points par 9 coordonnées, etc...
La position d'un solide est repérée par la position de chacun de ses points, qui sont en nombre infini. Dans le premier cas on parle de système discret et on peut les étudier mathématiquement dans des espaces vectoriels de dimension finie, à l'aide du calcul matriciel. Dans le deuxième cas on a affaire à des systèmes continus qui nécessitent de travailler dans des espaces de dimension infinie, mathématiquement beaucoup plus compliqués, que nous éviterons autant que possible dans ce cours. D'ailleurs une bonne compréhension du cas discret permet d'aborder plus facilement le cas continu.

L'objectif du cours est d'exposer les fondements mathématiques de la théorie quantique sur des modèles discrets. Ce cours est avant tout un cours de mathématiques, motivé par l'utilisation qui en faite dans un domaine de la physique où leur présence est particulièrement forte et à un niveau d'abstraction élevé. J'ai essayé d'expliquer les raisons de ce fait (inéluctable!) dans une conférence donnée en 2007, chargeable sur ma page web: Mathématiques et Physique. Le langage de la Nature est-il mathématique? http://www.math.sciences.univ-nantes.fr/robert/

Partie I: Nombres et Espaces

1. Nombres complexes-rotations planes.
2. Espaces vectoriels euclidiens. Applications linéaires. Bases. Matrices.
3. Espaces hermitiens-Opérateurs-Produits Tensoriels.
4. Etude des rotations de l'espace-quaternions-matrices de Pauli.

Partie II: Modèles quantiques

1. Principes généraux de la mécanique quantique-Interprétation de l'expérience de Stern-Gerlach.
2. Polarisation de la lumière et spin. Notion de QU-BIT.
3. Intrication-Corrélations quantiques. Inégalités de Bell.
4. Introduction au calcul et à la logique quantique.

"All the mathematical sciences are founded on relations between physical laws and laws of numbers, so the aim of exact science is to reduce the problems of nature to the determination of quantities by operations with numbers" J. C. Maxwell, physicien Ecossais, 1831-1879.

Les ensembles de nombres usuels en mathématiques sont notés $\mathbb{N}, \mathbb{Z}, \mathbb{Q}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$.
$\mathbb{N}$ est l'ensemble de entiers naturels, $\{0, 1, 2, \cdots, n, n+1, \cdots\}$.
Une notion basique est celle de **nombre premier**. C'est est nombre au moins égal à 2, qui n'est divisible que par 1 et lui-même. 2, 3, 5, 7, 11, 13 sont premiers. 12 n'est pas premier. Le plus grand nombre premier connu à ce jour est $2^{43112609} - 1$, qui comporte près de 13 000 000 chiffres en écriture décimale. Les nombres premiers sont utilisés pour coder des informations (codes des cartes bancaires par exemples). On trouve ensuite l'ensemble $\mathbb{Z}$ les entiers relatifs, $x = \pm n$, $n \in \mathbb{N}$. Tout entier relatif est différence de 2 entiers naturels (et inversement). Tout entier $x \in \mathbb{Z}$ a un inverse pour l'addition noté $-x$, $x + (-x) = 0$, on écrit $x - x = 0$.

Afin d'avoir un inverse pour la multiplication on a construit l'ensemble $\mathbb{Q}$ des nombres rationnels. Tout nombre $r \in \mathbb{Q}$, $r \neq 0$, s'écrit $r = \pm\frac{p}{q}$, $p, q \in \mathbb{N}$. Cette décomposition est unique si on impose que les entiers p, q sont premiers entre eux. On dit alors que la fraction est irréductible.
r admet un inverse pour la multiplication, $r^{-1} = \frac{1}{r} = \pm\frac{q}{p}$.

Dans l'antiquité , la découverte de l'existence de rapports de longueurs non rationnels (irrationnels), provoqua un choc. Cela a été remarqué par Euclide: le rapport de la longueur de la diagonale d'un carré sur la longueur d'un coté ne peut pas être un nombre rationnel.
Preuve: On raisonne par l'absurde en supposant que $\sqrt{2} = p/q$, et en écrivant la fraction sous forme irréductible.
L'ensemble des nombres rationnels étant insuffisant, il a fallut imaginer l'existence d'un ensemble de nombres plus vaste. Ce n'est qu'au 19ième siècle que les mathématiciens Cauchy, Bolzano, Weierstass, Cantor, entre autes ont formulé une construction précise, rigoureuse de l'ensemble $\mathbb{R}$ des nombres réels. Cette construction est subtile. $\mathbb{R}$ est beaucoup plus compliqué que $\mathbb{Q}$: $\mathbb{Q}$ est dénombrable (on peut en énumérer ses éléments sous forme d'une suite), $\mathbb{R}$ **n'est pas dénombrable**. On dit qu'il a la puissance du continu.

Bien qu'il y ait beaucoup plus de nombres irrationnels que de nombres rationnels, on a plus de mal à citer des nombres irrationnels $\sqrt{p}$, p entier premier, π, $\exp(1)$, $\zeta(3)$ et ensuite?
π est plus difficile à saisir que $\sqrt{2}$ ou que $5^{1/3}$. Ces derniers vérifient une équation algébrique à coefficients entiers ($x^2 - 2 = 0$, $x^3 - 5 = 0$). π ne vérifie aucune équation algébrique à coefficients entiers, on dit qu'il est **transcendant**.

Développements d'un nombre réel

On a l'habitube de représenter un réel en base 10. Les ordinateurs travaillent en base 2. On rappelle ici ce que cela signifie. On suppose de x est un réel positif. On commence par extraire sa partie entière, $E(x) = [x]$. C'est l'unique entier naturel n vérifiant $n \leq x < n + 1$. Représenter graphiquement la fonction E.
En base 10, on a, n étant un entier,

$$n = d_m 10^m + \cdots + d_1 10 + d_0, \;\; d_j = 0, 1, \cdots, 9, \;\; d_m \neq 0.$$

En base 2, on aura:

$$n = c_p 2^p + \cdots + c_1 2 + c_0, \quad c_j = 0, 1, \ c_p \neq 0.$$

Exercice: représenter en base 2 les entiers 5, 6, 7, 8.
Ecrire en base 10 le nombre représenté en base 2 par 1011.

Maintenant on traite le cas où $x \in [0, 1[$. On obtient les décimales successives de la manière suivante. $d_1 = [10x]$. On a alors $d_1 = 0, \cdots, 9$ et

$$0 \leq x - \frac{d_1}{10} < \frac{1}{10}$$

Les décimales successives sont déterminées par récurrence. Voici comment. On pose

$$x_j = \frac{d_1}{10} + \frac{d_2}{10^2} + \cdots + \frac{d_j}{10^j}, \quad d_{j+1} = E(10^{j+1}(x - x_j))$$

On a alors

$$d_{j+1} = E(10^{j+1}(x - x_j)), \ x_{j+1} = x_j + \frac{d_{j+1}}{10^{j+1}} \tag{1}$$

$$0 \leq x - x_{j+1} < \frac{1}{10^{j+1}} \tag{2}$$

On peut faire exactement la même chose en remplaçant 10 par 2. Alors les entiers d_j sont remplacés par des entiers b_k, prenant les 2 valeurs 0, 1. On obtient ainsi le développement binaire (on dit aussi dyadique, de x).
Exercice. Ecrire le développement binaire de $1/3$ à 2^{-4} près

Non unicité

Les nombres décimaux ont deux développements. L'un fini, l'autre infini, se terminant par des neufs. Les réels non décimaux ont un unique développement.

$$\frac{1}{10} = 0,1 = 0,99\cdots 9\cdots$$

Il en de même pour la base 2 et les nombres dyadiques (9 est remplacé par 1).

$$\frac{1}{2} = 0,1 = 0,01\cdots 1\cdots$$

Ceci est une conséquence de la formule donnant la somme d'une progression géométrique de raison $a \in]0, 1[$

$$\sum_{n=1}^{n=+\infty} a^n = \frac{a}{1-a}$$

Caractérisation des nombres rationnels

Un nombre réel x est rationnel **si et seulement si** son développement en base 2 ou 10 (ou dans une base quelconque) est **périodique à partir d'un certain rang** (sujet de réflexion laissé au lecteur). On pourra vérifier cette propriété sur $\frac{1}{4}, \frac{1}{3}, \frac{1}{7}$.

En un certain sens l'ensemble des réels est satisfaisant pour résoudre les problèmes de mesure de grandeurs géométriques ou physique. On commence cependant à rencontrer des difficultés dès que l'on veut résoudre des équations du second degré. $x^2 + 1 = 0$ n'a pas de solution réelle. Les mathématiciens n'aiment pas les équations sans solution! Des mathématiciens italiens, Cardan (1501-1576), Bombelli(1526-1572) ont commencé à utiliser des nombres imaginaires pour faciliter la résolutions d'équations du second et troisième degré. Il a fallu 2 à 3 siècles pour qu'une définition claire des nombres complexes soit enfin explicitée : Gauss (1777-1855), Cauchy (1789-1857), Hamilton (1805-1865).

Il est commode de visualiser les nombres complexes comme les points du plan muni d'un repère orthonormé $\{O, \vec{u}, \vec{v}\}$. La droite Ox dirigée suivant le vcteur $\vec{u}$ porte les nombres réels, la droite Oy dirigée suivant le vecteur $\vec{v}$ porte les nombres imaginaires. On note par i le nombre imaginaire associé au point de coordonnées $(0, 1)$ et par 1 le nombre (réel) associé au point $(1, 0)$. Alors, à tout point M du plan on associe ses coordonnées (x, y) et un nombre " complexe" noté $z = x + iy$. On définit ainsi une addition sur l'ensemble des nombres complexes. Le point clé est de définir une "bonne " multiplication. L'objectif étant d'obtenir une racine racine carrée pour les réels négatifs, on impose la règle $i \times i = i^2 = -1$. Ce qui revient à poser

$$(x + iy)(x' + iy') = (xx' - yy') + i(xy' + yx')$$

L'ensemble noté $\mathbb{C}$ des nombres complexes ainsi construit est en réalité l'ensemble de couples (x, y) de nombres réels (noté $\mathbb{R} \times \mathbb{R} = \mathbb{R}^2$) , ce dernier étant muni de son addition naturelle et de la multiplication :

$$(x, y) \times (x', y') = (xx' - yy', xy' + yx')$$

Dans cette représentation, en identifiant $(1, 0)$ avec le nombre réel 1 et $(0, 1)$ avec i on a bien $(0, 1) \times (0, 1) = (-1, 0) = -(1, 0)$, ce qui se traduit encore par $i^2 = -1$.

Propriétés de la multiplication

Si $z = x + iy$, on pose $\bar{z} = x - iy$ (conjugué de z, parfois noté z^*) et $|z| = \sqrt{z\bar{z}}$ (module de z). On note que $|z|^2 = x^2 + y^2$

$$zz' = z'z \quad \text{(commutativité)} \tag{3}$$
$$z(z'z'') = (zz')z'' \quad \text{(associativité)} \tag{4}$$
$$\frac{1}{z} = \frac{\bar{z}}{|z|^2}, \quad \text{si} \quad z \neq 0. \tag{5}$$

Représentation polaire

$$z = r\cos\theta + ir\sin\theta, \quad r = |z|$$

formule d'Euler

$$\boxed{\cos\theta + i\sin\theta = \mathrm{e}^{i\theta}}$$

La fonction exponentielle complexe est définie comme une somme de série :

$$\mathrm{e}^z = \sum_{0 \leq n < +\infty} \frac{z^n}{n!}$$

Elle vérifie l'importante propriété :

$$\mathrm{e}^{z+z'} = \mathrm{e}^z.\mathrm{e}^{z'}$$

Exercice

Retrouver les formules classiques de trigonométrie en utilisant la formule d'Euler et les propriétés de l'exponentielle.
($\cos(\theta + \theta') =?$, $\sin(\theta + \theta') =?$.

On peut imaginer d'autres représentations équivalentes de l'ensemble $\mathbb{C}$. En voici une autre, utilisant les matrices réelles 2×2 au lieu du plan $\mathbb{R}^2$.
Une matrice réelle est un tableau de 4 nombres réels disposés en carré :

$$Z = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

Ces matrices expriment les changements de coordonnées des transformations linéaires du plan, dans le repaire $\{O, \vec{u}, \vec{v}\}$. Par exemple une rotation d'angle θ est donnée par la matrice

$$Z = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

On désigne par $M_2(\mathbb{R})$ l'ensemble des matrices réelles 2×2. Cet ensemble est naturellement muni d'une addition. Il est aussi muni d'un produit, défini comme suit: si Z est associée à une transformation T et Z' à une transformation T', ZZ' est associée à la transformation $T \circ T'$ (composition). Explicitons (notations évidentes), si $ZZ' = Z''$ alors

$$Z'' = \begin{pmatrix} aa' + bc' & ab' + bd' \\ ca' + dc' & cb' + dd' \end{pmatrix}$$

On désigne par $S_2(\mathbb{R})$ les matrices associées aux similitudes du plan. Ces matrices sont de la forme

$$Z = \begin{pmatrix} x & -y \\ y & x \end{pmatrix}$$

On note

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

On constate que $Z = xE + yJ$ et que $J^2 = -E$.

On a alors $ZZ' = (xx' - yy\prime)E + (xy' + x'y)J$. On constate ainsi que $S_2(\mathbb{R})$ muni de ses opérations représente $\mathbb{C}$, en identifiant E avec le réel 1 et J avec l'imaginaire i.
Il est alors immédiat de voir que la multiplication par une nombre complexe z agit dans le plan comme une **similitude** d'angle θ de rapport $|z|$.
Rappel. Une similitude est le composé d'une homothétie et d'une rotation.

Exercices

1. Résoudre dans $\mathbb{C}$ l'équation $z^3 = 1$ puis plus généralement l'équation $z^n = 1$.
2. Soit Z un nombre complexe donné. Résoudre l'équation en z, $\exp(z) = Z$. Cas particulier $Z = 1, -1, i$. Que remarquez-vous?
3. Déterminer le transformé d'une droite horizontale par la fonction exponentielle, puis d'une droite verticale.

On verra comment les nombres complexes interviennent d'une manière fondamentale en physique quantique. Auparavant les physiciens avaient déjà remarqué que l'utilisation des nombres complexes permet de rendre certains calculs plus élégants et plus simples, notamment en électricité, en optique et en mécanique.
En électricité, la notation i est remplacée par la notation j (en mathématique j désigne souvent le nombre complexe $\exp(i\frac{2\pi}{3})$, l'une des racines cubiques de 1).
Les relations fondamentales en électricité sont

$$\boxed{i = \frac{dq}{dt}}, \quad \boxed{p = u \times i}, \quad \boxed{u = R \times i} \tag{6}$$

Pour une bobine, d'inductance L on a $\boxed{u(t) = L\frac{di}{dt}}$.

Pour un condensateur de capacité C on a $\boxed{i(t) = C\frac{du}{dt}}$.

Un courant alternatif est représenté par un signal périodique s, de période T. On a donc $\boxed{s(t) = s(t + kT)}$, pour tout entier k. La fréquence du signal est l'inverse de sa période, $\boxed{f = \frac{1}{T}}$.

La valeur **moyenne** de s est $\boxed{< S_m >= \frac{1}{T}\int_0^T s(t)dt}$.

La valeur **efficace** de s est $\boxed{< S_e >= \sqrt{\frac{1}{T}\int_0^T s^2(t)dt}}$

Signaux sinusoïdaux

.
$\boxed{s(t) = S\sin(\omega.t + \varphi)}$.

- S est l'amplitude du signal
- ω est la pulsation du signal. Noter que $\omega = 2\pi f$ et que $T = \frac{2\pi}{\omega}$.
- $\omega.t + \varphi := \varphi_t$ est la phase instantanée, $\varphi = \varphi_0$ est la phase initiale.

Un calcul d'intégrale donne ici $\boxed{S_e = \frac{S}{\sqrt{2}}}$.

C'est une conséquence de la formule $\sin^2(t) = \frac{1-\cos(2t)}{2}$.
La représentation complexe consiste à considérer que $s(t)$ est la partie imaginaire d'un signal complexe $\widetilde{S}(t)$,

$$\boxed{\widetilde{S}(t) = S\big[\cos(\omega t + \varphi) + j\sin(\omega t + \varphi)\big] = S\exp[j(\omega t + \varphi)]}$$

On introduit alors naturellement **l'impédance complexe**,

$$\boxed{\widetilde{Z} = \frac{\widetilde{U}}{\widetilde{I}}}$$

Pour une résistance, une inductance, un condensateur on obtient

$$\boxed{\widetilde{Z}_R = R}, \quad \boxed{\widetilde{Z}_L = jL\omega}, \quad \boxed{\widetilde{Z}_C = \frac{1}{jC\omega}}$$

Donc l'impédance d'une résistance est un nombre réel > 0, alors que l'impédance d'une inductance a une partie imaginaire > 0 et l'impédance d'une condensateur a une partie imaginaire < 0.

Introduction
Plan du cours
Ensembles de nombres
Partir des entiers
Les nombres réels
Les nombres complexes
utilisation des nombres complexes en physique

Didier Robert Facultés des Sciences et Techniques Laboratoire de Mathématiques Quantiques Discrètes

Introduction
Plan du cours
Ensembles de nombres
Partir des entiers
Les nombres réels
Les nombres complexes
utilisation des nombres complexes en physique

Quelques références bibliographiques mathématiques

T.J. Fletcher: L'algèbre linéaire par ses applications (consultable en bibliothèque).
livres de mathématiques de terminale S et de 1er cycle universitaire.

Didier Robert Facultés des Sciences et Techniques Laboratoire de Mathématiques Quantiques Discrètes

Introduction
Plan du cours
Ensembles de nombres
Partir des entiers
Les nombres réels
Les nombres complexes
utilisation des nombres complexes en physique

Quelques références bibliographiques physiques

M. Le Bellac.
Introduction à l'informatique quantique, Editions Belin.
M. A. Nielsen and I. L. Chuang.
Quantum computation and Quantum Information
J.M. Lévy-Leblond et F. Balibar.
Quantique - Rudiments. InterEditions, CNRS.
J.L. Basdevant.
Mécanique Quantique, Ellipses, Ecole Polytechnique.

Didier Robert Facultés des Sciences et Techniques Laboratoire de Mathématiques Quantiques Discrètes