Trucs spectraux et Hilbert

Sous la direction de Bernard Randé et Julien Royer
Mathias Garnier
2024

Résumé

Vade mecum

Très (trop) jeune, les mots *réduction des endomorphismes* me sont apparus. J'en ai toujours nourri une certaine fascination mêlée d'une nette incompréhension. Il faut dire qu'il m'en a fallu du temps avant de comprendre ce que diable pouvait bien se cacher sous pareille appellation...

À maintes reprises, j'ai pu y être confronté. Que dire de ma joie (et celle de mes camarades) quand nous avons appris que la seconde partie du cours d'atomistique de **J. Cuny** ramènerait des considérations sur les orbitales moléculaires à une histoire de diagonalisation d'une matrice, d'un opérateur. Ni une, ni deux, je suis allé embêter J. Cuny en lui demandant un "stage de chimie sans chimie". Aussi paradoxal que cela puisse paraître, il a su vers qui m'orienter : quelle chance j'ai eu de rencontrer **A. Scemama**. Il m'a introduit à de très belles idées que je n'ai qu'au mieux partiellement compris. Je le remercie infiniment pour sa patience.

La merveilleuse introduction que j'ai eu de la chimie quantique avec A. Scemama m'a permis de rencontrer mes premiers Hilbert (en particulier dans le monumental livre de Cohen-Tannoudji), de voir de sacrées opérations dans des algèbres de matrices, de l'optimisation grandeur nature et beaucoup de ruse.

En parallèle de cela, j'ai pu commencer à questionner **Julien Royer** en fin de cours sur divers points. Au fur et à mesure, j'ai cru apercevoir quelques unes des fantastiques applications de la théorie spectrale. Une entrevue m'a décidément convaincu de me lancer dans cette voie.@*todo*

C'est ensuite la rencontre avec **Rached Mneimné** [1] qui m'a conduit vers **Bernard Randé**. @*todo*

À cela s'ajoute une heureuse coïncidence. Dans le cadre du projet de quatrième semestre en Parcours Spécial (UT3), **Thomas Dedieu** a proposé une multitude de sujets. Un pré-projet, un peu lointain des considérations présentes, a tout d'abord permis de découvrir la géométrie projective (via l'algèbre linéaire). Ensuite, la réduction des endomorphismes réapparaît sous le spectre de la théorie des modules. Avec **Elias Garcia-Naze**, @*todo*

Matériellement, ce projet d'introduction à un domaine de recherche s'est tenu en deux parties. Une première en janvier à Paris, puis, une seconde durant mon quatrième semestre. J'ai néanmoins quelque peu anticipé en découvrant dans ses grandes lignes l'analyse fonctionnelle grâce au livre *Beginning Functional Analysis* de **Karen Saxe** ou en étudiant le *Cours d'algèbre* de **Roger Godement**.

Dans la continuité de ce projet, (au moins) deux voies se présentent. Une première en direction des équations aux dérivées partielles (avec possibilité d'ouverture à certaines équations issues de la physique) et une deuxième en direction de la théorie des nombres, de la théorie des représentations... (fonctions L, formes automorphes, séries d'Eisenstein...). On verra bien où l'on ira...

1. Rached que je remercie sincèrement pour tout ce qu'il a pu m'apprendre et me faire découvrir... *toujours commencer par des exemples !*

Table des matières

1 Vocabulaire Mathématique

On s'inspire très fortement de la présentation adoptée par Pierre Colmez dans *Éléments d'analyse et d'algèbre (et de théorie des nombres)*. À cet effet, on compile et structure divers ensembles de résultats figurant comme pré-requis à ce projet. Tous ne sont pas absolument nécessaires ; néanmoins ils constituent un tout. Aucun développement n'est fait, seuls les grands traits sont esquissés. Tout approfondissement nécessaire sera traité dans une partie ultérieure. Il faut bien comprendre cette partie comme un répertoire de définitions voire une suite de notes de cours.

Ne figurent que ce qui a été vu en cours par l'auteur (au moment où il écrit) ou bien quelques ramifications naturelles (par exemple, la topologie générale s'aborde à moindre coût après un cours d'introduction au calcul différentiel).

1.1 Topologie générale

La partie suivante provient trait pour trait d'un document de Pierre-Jean Hormière (qui ne se trouve malheureusement plus en ligne). On laisse néanmoins de côté les filtres.

Définition 1 (Espace topologique). *Soit X un ensemble et $\mathscr{P}(X)$ l'ensemble de ses parties. Soit $\mathscr{T} \subset \mathscr{P}(X)$. L'ensemble $\mathscr{T}$ est une topologie sur X si les conditions suivantes sont vérifiées :*

— *$\emptyset \in \mathscr{T}$ et $X \subset \mathscr{T}$,*

— *toute réunion d'éléments de $\mathscr{T}$ est un élément de $\mathscr{T}$,*

— *toute intersection finie d'éléments de $\mathscr{T}$ est un élément de $\mathscr{T}$.*

La paire $(X, \mathscr{T})$ est alors un espace topologique. Un élément de $\mathscr{T}$ est appelé ouvert (pour la topologie $\mathscr{T}$). Un élément de $\mathscr{T}$ est dit fermé si son complémentaire est ouvert.

Au sein d'une topologie, on peut caractériser les points selon différentes typologies.

Définition 2 (Intérieur). *Soit X un espace topologique et $A \subset X$. Un point $x \in X$ est dit intérieur à A s'il existe un ouvert U de X tel que $x \in U$ et $U \subset A$. L'ensemble des points intérieurs à A s'appelle l'intérieur de A et se note $Int(A)$ ou $\mathring{A}$. L'ensemble $Int(A)$ est le plus grand ouvert contenu dans A.*

Définition 3 (Voisinage). *Soit X un espace topologique, $x \in X$ et $A \subset X$. On dit que $V \subset \mathscr{P}(X)$ est un voisinage de x si $x \in Int(V)$, c'est-à-dire s'il existe un ouvert U tel que $x \in U$ et $U \subset V$. Plus généralement, on dit que V est un voisinage de A s'il contient un ouvert contenant A.*

On peut alors voir qu'un ensemble est ouvert si et seulement s'il est voisinage de chacun de ses points. Les voisinages ne permettent pas seulement de reformuler des propriétés que l'on connaît intuitivement. Ils peuvent également servir à bâtir de nouvelles notions.

Définition 4 (Adhérence). *Soit X un espace topologique, un point $x \in X$ est dit adhérent à un ensemble A si tout voisinage de x rencontre A. L'ensemble des points adhérents à A s'appelle l'adhérence de A et se note $Adh(A)$ ou $\overline{A}$. L'adhérence de A est le plus petit fermé contenant A.*

On trouve deux types de points adhérents à un ensemble A en fonction de si $x \in A$ ou pas. Si tel est le cas on parlera de point isolé de A. Sinon, on parlera de point d'accumulation ou point limite de A.

Un ensemble est alors fermé si et seulement s'il contient tous ses points d'accumulation.

Définition 5 (Densité)**.** *Une partie A d'un espace topologique X est dite dense, ou partout dense, si $\overline{A} = X$, autrement dit si tout ouvert non vide rencontre A.*

Définition 6 (Extérieur, Frontière)**.** *On appelle extérieur de A, noté $Ext(A)$, le complémentaire de son adhérence ou encore l'intérieur de son complémentaire.*

On appelle frontière de A, notée $Fr(A)$, l'ensemble des points adhérents à la fois à A et à son complémentaire dans X.

Définition 7 (Séparation)**.** *L'espace topologique X est dit séparé si deux points distincts peuvent être séparés par des voisinages distincts, autrement dit :*

$$\forall (x,y) \in X^2,\ x \neq y \implies \exists (U,V) \in \mathcal{V}(x) \times \mathcal{V}(y),\ U \cap V = \emptyset \tag{1}$$

Par exemple, tout espace métrique est un espace séparé.

Une différence essentielle entre les espaces métriques et les espaces topologiques tient au fait que la notion de convergence n'est plus aussi directe, elle nécessite un peu plus de travail.

Définition 8 (Suite convergente)**.** *On dit qu'une suite $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'éléments d'un espace topologique X converge si :*

$$\exists x \in X,\ \forall V \in \mathcal{V}(x),\ \exists n_0 \in \mathbb{N},\ \forall n \geq n_0,\ x_n \in V. \tag{2}$$

Dans un espace topologique, on perd certaines propriétés. Par exemple, une suite convergente n'a pas forcément une unique limite (sauf si l'espace topologique est séparé). Néanmoins, on peut utiliser des propriétés séquentielles pour reformuler des résultats que l'on connaît déjà. Par exemple, une partie A d'un espace topologique X est dite séquentiellement fermée si, pour tout suite $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de points de A convergente dans X, on a :

$$x = \lim x_n \implies x \in A. \tag{3}$$

On peut alors montrer que toute partie fermée et séquentiellement fermée (et la réciproque est vraie moyennant l'introduction de *systèmes fondamentaux dénombrables de voisinages*, ce qu'on laisse à un besoin ultérieur).

Notons que si l'on peut définir la convergence d'une suite, nous avons tous les ingrédients pour étudier la continuité de fonctions.

Définition 9 (Continuité)**.** *Soient X et X' deux espaces topologiques et f une application de X dans X'. On dit que l'application $f : X \to X'$ est continue en $x_0 \in X$ si elle vérifie l'une des conditions équivalentes suivantes :*

1. *pour toute suite (généralisée) $(x_a)_{a\in I}$ d'éléments de X tendant vers x_0, la suite $(f(x_a))_{a\in I}$ tend vers $f(x_0)$.*
2. *L'image réciproque par f de tout voisinage de $f(x_0)$ dans X' est un voisinage de x_0 dans X.*
3. *Pour tout voisinage $\mathcal{V}'$ de $f(x_0)$ dans X', il existe un voisinage $\mathcal{V}$ de x_0 dans X tel que*

$$x \in \mathcal{V} \implies f(x) \in \mathcal{V}'. \tag{4}$$

L'application f est alors dite continue si elle est continue en tout point de X.

On retrouve bon nombre de propriétés habituelles (par exemple, la composée de deux fonctions continue est continue). Mais, avec le langage topologique, on peut également formuler la continuité globale de nouvelles manières. En effet, il est équivalent qu'une fonction $f : X \to X'$ entre deux espaces topologiques X et X' soit continue et que l'image réciproque par f de tout ouvert de X' (resp. fermé de X') est ou ouvert de X (resp. fermé de X).

Définition 10 (Homéomorphisme)**.** *Soient X et X' deux espaces topologiques. Une application $f : X \to X'$ est appelée homéomorphisme (ou bijection continue) si elle est bijective, continue et de même pour sa bijection réciproque.*

Avec tout ce vocabulaire on peut comparer les topologies entre elles.

Définition 11 (Finesse)**.** *Soient $\mathcal{T}_1$ et $\mathcal{T}_2$ deux topologies sur un même ensemble X. On dit que $\mathcal{T}_1$ est plus fine que $\mathcal{T}_2$ si l'application identité $(X, \mathcal{T}_1) \to (X, \mathcal{T}_2)$ est continue, autrement dit si tout ouvert (resp. fermé) de $\mathcal{T}_2$ est un ouvert (resp. fermé) de $\mathcal{T}_1$.*

On laisse de côté bon nombre de considérations (topologie faible, forte, topologie spectrale, modes de convergence) sur lesquels nous aurons sûrement le temps de revenir en détail par la suite. On réserve également un ensemble de notions maîtres à plus tard : la compacité, la connexité...

1.2 Algèbre linéaire élémentaire

Pour l'essentiel, on suit sans surprise le Grifone (chapitres 1, 3). On évacue bon nombre de résultats jugés évidents mais non absolument essentiels. Les démonstrations ne sont pas reproduites (elles se trouvent toutes dans le Grifone).

1.2.1 Espaces vectoriels

Définition 12 (Espace vectoriel sur k)**.** *Soit k un corps commutatif. On appelle espace vectoriel sur k un ensemble E sur lequel on a défini deux lois de composition.*

A) *Une loi interne $E \times E \to E$ notée additivement vérifiant :*

1. $(x+y)+z = x+(y+z)$ *et* $x+y = y+x \qquad \forall (x,y,z) \in E^3$,
2. *Il existe un élément neutre dans E noté 0 tel que pour tout élément x de E, on ait $x+0 = x$.*
3. *Pour tout $x \in E$, il existe un élément opposé de x noté $-x$ tel que $x+(-x) = 0$.*

B) *Une loi externe $k \times E \to E$ notée multiplicativement vérifiant :*

1. $\lambda(\mu x) = (\lambda\mu)x, \qquad \forall (\lambda,\mu) \in k^2,\ x \in E,$
2. $(\lambda+\mu)x = \lambda x + \mu x, \qquad \forall (\lambda,\mu) \in k^2,\ x \in E,$
3. $\lambda(x+y) = \lambda x + \lambda y, \qquad \forall \lambda \in k,\ \forall (x,y) \in E^2,$
4. $1x = x \qquad \forall x \in E.$

Les éléments de k sont dits scalaires et ceux de E vecteurs.

Définition 13 (Sous-espace vectoriel)**.** *Soit E un espace vectoriel et F une partie non vide de E. On dit que F est un sous-espace vectoriel de E si la restriction des lois de E à F fait de F un espace vectoriel.*

Si $F \subset E$, alors F est un sous-espace vectoriel de E si et seulement si :

1. *$F \neq \emptyset$,*
2. *$\forall (x,y) \in F^2$, $\forall (\lambda,\mu) \in k^2$, on a $\lambda x + \mu y \in F$.*

On peut caractériser tous les sous-espaces vectoriels de la manière suivante. Soit $x_1,\ldots,x_p$ une famille d'éléments de E. On peut former le sous-espace engendré par cette famille (également appelé espace des combinaisons linéaires de $x_1,\ldots,x_p$) que l'on note $\mathrm{Vect}\{x_1,\ldots,x_p\}$. Formellement, on a :

$$\mathrm{Vect}\{x_1,\ldots,x_p\} := \left\{ y \in E \;\middle|\; \exists (\lambda_1,\ldots,\lambda_p) \in k^p,\ y = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i x_i \right\}. \tag{5}$$

Deux cas particuliers en sont la droite vectorielle ($p = 1$) et le plan vectoriel ($p = 2$).

On vient de voir que l'on pouvait *générer* un espace vectoriel à partir d'une famille de vecteurs. Certaines familles ont la propriété remarquable de générer un espace vectoriel tout en le faisant *optimalement*.

Définition 14 (Base, dimension finie)**.** *Soit une famille $\mathcal{V} = \{v_1,\ldots,v_p\}$ de vecteurs de E. Cette famille est dite génératrice si $E = \mathrm{Vect}\{\mathcal{V}\}$. En d'autres termes, tout vecteur de E se décompose comme combinaison linéaire des éléments de $\mathcal{V}$. Dans le cas où $\mathcal{V}$ contient un nombre fini d'éléments, on dit que l'espace vectoriel est de dimension finie. De plus* [2]*, la famille $\mathcal{V}$ est dite libre si les éléments de cette famille sont linéairement indépendants.*

Dans le cas où la famille $\mathcal{V}$ est à la fois libre et génératrice, on dit que $\mathcal{V}$ est une base de E.

Une famille est alors une base de E si et seulement si tout élément de E se décompose de manière unique selon les éléments de cette famille.

Théorème 15. *Soit E un k-espace vectoriel de dimension finie.*

1. ***Existence de bases en dimension finie**. L'espace vectoriel E admet une base.*
2. ***Théorème de la base incomplète**. Une famille libre de vecteurs de E peut être complétée en une base de E.*
3. ***Théorème d'extraction de bases**. D'une famille génératrice finie de vecteurs de E on peut extraire une base de E.*

Définition 16 (Base, dimension infinie)**.** *Soit une famille $\mathcal{V}$ d'éléments de E non nécessairement finie ni dénombrable. La famille $\mathcal{V}$ est dite génératrice si $\mathrm{Vect}\{\mathcal{V}\} = E$, c'est-à-dire si, pour tout élément x de E, il existe une sous-famille $\mathcal{I}$ de $\mathcal{V}$ finie telle que x se décompose comme combinaison linéaire d'éléments de $\mathcal{I}$. La famille $\mathcal{V}$ est dite libre si toute sous-famille finie est libre. Ainsi, la famille $\mathcal{V}$ est une base si elle est libre et génératrice.*

2. On voit le cas en dimension infinie ci-dessous.

Dans le cas d'un espace vectoriel de dimension infinie, on retrouve des résultats similaires à ceux du théorème 15. Néanmoins, l'axiome du choix fait irruption.

Notons toutefois qu'en dimension finie, tout ce que l'on est en droit d'attendre fonctionne. Par exemple, toutes les bases d'un même espace vectoriel ont le même nombre d'éléments. Ou alors, on peut formaliser des idées géométriques : soient $E_1,\dots,E_p$ des espaces vectoriels de dimension finie sur le même corps k. Alors :

$$\dim_k(E_1\times\ldots\times E_p)=\dim_k(E_1)+\ldots+\dim_k(E_p). \tag{6}$$

On peut se servir de la théorie de la dimension pour basculer des raisonnements "ensemblistes" vers des comparaisons numériques. Par exemple, soit E un espace vectoriel de dimension finie et F un sous-espace vectoriel de E. Alors F est de dimension finie et l'on a $\dim_k(F)\leq\dim_k(E)$ et $\dim_k(F)=\dim_k(E)\Longleftrightarrow F=E$. On découvrira bientôt que l'égalité n'est pas aussi stricte que ce qu'on pourrait le penser (elle se fait *à isomorphisme près*).

Définition 17 (Somme, somme directe, supplémentaires)**.** *Soient E_1 et E_2 deux sous-espaces vectoriels d'un espace vectoriel E. On appelle somme de E_1 et E_2 le sous-espace vectoriel de E défini par :*

$$E_1+E_2=\{x\in E\mid\exists(x_1,x_2)\in E_1\times E_2,\ x=x_1+x_2\}. \tag{7}$$

On dit que la décomposition de tout élément de E_1+E_2 en somme d'un élément de E_1 et d'un élément de E_2 est unique si et seulement si $E_1\cap E_2=\{0\}$. Dans ce cas là, E_1+E_2 est dit somme directe de E_1 et E_2. Les sous-espaces vectoriels E_1 et E_2 sont dits supplémentaires (ou que E_2 est un supplémentaire de E_1) si $E=E_1\oplus E_2$. Le supplémentaire d'un espace vectoriel n'est pas unique, néanmoins en dimension finie tous les supplémentaires d'un même espace vectoriel ont même dimension.

On généralise sans problème la définition précédente au cas de n sous-espaces vectoriels. Néanmoins, ce n'est pas le cas de la formule de Grassmann (sauf le cas particulier d'une somme directe d'un nombre fini de sous-espaces vectoriels).

Proposition 18 (Formule de Grassmann)**.** *Soit E un espace vectoriel de dimension finie et E_1 et E_2 deux sous-espaces vectoriels de E. On a alors :*

$$\dim_k(E_1+E_2)=\dim_k(E_1)+\dim_k(E_2)-\dim_k(E_1\cap E_2). \tag{8}$$

En particulier :

$$\dim_k(E_1\oplus E_2)=\dim_k(E_1)+\dim_k(E_2). \tag{9}$$

1.2.2 Applications linéaires

Définition 19 (Morphismes d'espaces vectoriels)**.** *Soient E et F deux espaces vectoriels sur le même corps k et f une application de E dans F. On dit que f est linéaire si :*
1. $f(v+w)=f(v)+f(w),\qquad\forall(v,w)\in E^2,$
2. $f(\lambda v)=\lambda f(v),\qquad\forall\lambda\in k,\ \forall v\in E.$

On note $Hom_k(E,F)$ l'ensemble des applications linéaires de E dans F. Lorsque $E=F$, on parle d'endomorphisme.

Soit $f \in Hom_k(E,F)$, le morphisme f est injectif si et seulement si $Ker(f) = \{0\}$, il est dit surjectif si et seulement si $Im(f) = F$. Dans le cas où f est à la fois injectif et surjectif, on dit que f est un isomorphisme. Et, lorsque $E = F$ et que f est un isomorphisme, on parle d'automorphisme.

On dira que deux espaces vectoriels de dimension finie sont isomorphes si et seulement si ils ont la même dimension. Dans le cas où E et F ont même dimension (finie), on a l'équivalence suivante :

$$f \text{ est injective} \iff f \text{ est surjective} \iff f \text{ est bijective.} \tag{10}$$

Néanmoins, lorsque E et F n'ont pas la même dimension, on peut toujours s'accrocher au résultat suivant.

Théorème 20 (Théorème du rang)**.** *Soient E et F deux espaces vectoriels de dimension finie et $f \in Hom_k(E,F)$. On a alors :*

$$\dim_k(E) = rg(f) + \dim_k(Ker(f)). \tag{11}$$

On peut donner une interprétation au rang (en plus de dire que c'est la *hauteur de l'escalier* lorsque l'on échelonne une matrice). Soit $\mathcal{V} = \{v_i\}_{i\in I}$ une famille de vecteurs. On appelle rang de la famille $\mathcal{V}$ la dimension de l'espace engendré par les vecteurs $\{v_i\}_{i\in I}$. Cette conception du rang sera fort utile du point de vue matriciel (le rang d'une matrice est alors le rang de la famille de ses vecteurs colonnes et bonne nouvelle, le rang d'une application linéaire est le même que celui de sa matrice associée, qu'importe la base).

1.2.3 Matrices d'une application linéaire

Soient E et F deux k-espaces vectoriels. Constatons que l'ensemble $\mathrm{Hom}_k(E,F)$ des applications linéaires de E dans F est lui-même un espace vectoriel (muni des lois usuelles). On remarque que, en particulier, $\mathrm{End}_k(E) := \mathrm{Hom}_k(E,E)$ est un espace vectoriel. Une fois cette constatation faite, on peut considérer les morphismes d'espaces vectoriels comme des vecteurs (et les voir comme des *points de l'espace*, en un sens que l'on demande ici intuitif). Deux voies s'offrent à nous : ou bien concevoir ces morphismes de manière abstraite ou alors leur donner une représentation concrète par le biais des matrices[3]. Présentons cette deuxième voie.

Pour toute la suite de cette partie, on fixe une base $\mathscr{E} = (e_1,\dots,e_n)$ de E ainsi qu'une base $\mathscr{F} = (f_1,\dots,f_p)$ de F.

Définition 21 (Matrice de f dans les bases $\mathscr{E}$, $\mathscr{F}$)**.** *On appelle matrice de f dans les bases $\mathscr{E}$, $\mathscr{F}$ la matrice notée $Mat(f)_{\mathscr{E},\mathscr{F}} \in \mathscr{M}_{p,n}(k)$ dont les colonnes sont les composantes des vecteurs $f(e_1),\dots,f(e_n)$ dans la base $\mathscr{F}$. On a donc :*

$$Mat(f)_{\mathscr{E},\mathscr{F}} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \dots & a_{pn} \end{pmatrix} \tag{12}$$

3. La représentation est alors parfaitement fidèle puisqu'il existe un isomorphisme d'espaces vectoriels entre $\mathrm{Hom}_k(E,F)$ et $\mathscr{M}_{p,n}(k)$, avec $\dim_k(E) = n$ et $\dim_k(F) = p$.

où $f(e_i) = \sum_{k=1}^{p} a_{ki} f_k$.

Définition 22 (Matrice d'un vecteur)**.** *Soit E un espace vectoriel de dimension n et x un élément de E dont la décomposition dans $\mathscr{E}$ est $x = x_1 e_1 + \dots x_n e_n$. On appelle matrice de x dans la base $\mathscr{E}$ la matrice colonne des composantes de x dans la base $\mathscr{E}$:*

$$Mat(x)_{\mathscr{E}} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}. \tag{13}$$

On peut alors combiner les deux résultats précédents pour pleinement utiliser le potentiel de la représentation matricielle d'une application linéaire.

Proposition 23 (Matrice de $f(x)$)**.** *Soient E et F deux espaces vectoriels sur k. Pour tout morphisme $f \in Hom_k(E,F)$ et pour tout élément $x \in E$, on a :*

$$Mat(f(x))_{\mathscr{F}} = Mat(f)_{\mathscr{E},\mathscr{F}} Mat(x)_{\mathscr{E}}. \tag{14}$$

En plus des bases $\mathscr{E}$ et $\mathscr{F}$, introduisons la base $\mathscr{G} = (g_1, \dots, g_q)$ du k-espace vectoriel G.

Proposition 24 (Matrice d'une composée)**.** *Soient E, F et G trois espaces vectoriels de dimension finie sur k. Si $g \in Hom_k(E,F)$ et $f \in Hom_k(F,G)$, on a :*

$$Mat(f \circ g)_{\mathscr{E},\mathscr{G}} = Mat(f)_{\mathscr{F},\mathscr{G}} Mat(g)_{\mathscr{E},\mathscr{F}}. \tag{15}$$

On rappelle que $\mathscr{E} = (e_1, \dots, e_n)$ n'est qu'un exemple de base de E. Introduisons une nouvelle base de E notée $\mathscr{E}' = (e'_1, \dots, e'_n)$. De même, pour F, introduisons une nouvelle base $\mathscr{F}' = (f'_1, \dots, f'_p)$.

Certaines bases étant plus adaptées que d'autres (en fonction de nos besoins...), on peut être très tenté de jongler entre les différentes bases. Les notions suivantes définissent précisément ce dont nous avons besoin pour passer d'une base à l'autre.

Définition 25 (Matrice de passage)**.** *On appelle matrice de passage de la base $\mathscr{E}$ à la base $\mathscr{E}'$ la matrice notée $P_{\mathscr{E}\to\mathscr{E}'}$ dont les colonnes sont les composantes des vecteurs e'_i dans la base $\mathscr{E}$. À cet effet :*

$$P_{\mathscr{E}\to\mathscr{E}'} = Mat(Id_E)_{\mathscr{E}',\mathscr{E}}. \tag{16}$$

Proposition 26 (Changement de base)**.** *Soit $f \in Hom_k(E,F)$. On a alors :*

$$Mat(f)_{\mathscr{E}',\mathscr{F}'} = (P_{\mathscr{F}\to\mathscr{F}'})^{-1} Mat(f)_{\mathscr{E},\mathscr{F}} P_{\mathscr{E}\to\mathscr{E}'} \tag{17}$$

$$= P_{\mathscr{F}'\to\mathscr{F}} Mat(f)_{\mathscr{E},\mathscr{F}} P_{\mathscr{E}\to\mathscr{E}'}. \tag{18}$$

Dans le cas où $f \in End_k(E)$, on a alors :

$$Mat(f)_{\mathscr{E}} = (P_{\mathscr{E}\to\mathscr{E}'})^{-1} Mat(f)_{\mathscr{E}'} P_{\mathscr{E}\to\mathscr{E}'}. \tag{19}$$

Définition 27 (Matrices semblables)**.** *Deux matrices A et B de $\mathscr{M}_n(k)$ sont dites semblables s'il existe une matrice inversible $P \in \mathscr{M}_n(k)$ telle que $B = P^{-1}AP$.*

1.2.4 Espace dual

Jusqu'alors, on a raisonné avec des familles de vecteurs. Par exemple, on a utilisé le caractère générateur de tel ou tel famille pour obtenir une décomposition de l'ensemble des éléments d'un espace vectoriel engendré par ladite famille. Il existe néanmoins un point de vue dual, on peut caractériser un espace vectoriel par la donnée d'équations linéaires. Tout le jeu revient alors à montrer comment passer d'un monde à l'autre.

Définition 28 (Forme linéaire)**.** *On appelle forme linéaire*[4] *sur E une application linéaire $\omega : E \to k$. L'ensemble des formes linéaires est noté E^* et est dit espace dual de E. Dans le cas où E est de dimension finie, E est isomorphe à son dual E^* et est canoniquement isomorphe à son bidual (le dual de son dual).*

On peut identifier très précisément les formes linéaires. Donnons nous une base de E, notée $\mathscr{E} = \{e_1, \dots, e_n\}$. Soit $x = x_1 e_1 + \dots + x_n e_n$ un élément de E. Soit ω une forme linéaire sur E, alors :

$$\omega(x) = x_1\omega(e_1) + \dots + x_n\omega(e_n) = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n, \text{ avec } a_i = \omega(e_i). \tag{20}$$

Supposons de plus que ω soit une forme linéaire non nulle. Comme $\omega(x) \in k$, on a $\dim_k(\mathrm{Im}(\omega)) = 1$ (puisque $\omega \neq 0$). En d'autres termes, le noyau de ω est un hyperplan de E (en effet, $\dim_k(\mathrm{Ker}(\omega)) = n - 1$). En vertu de l'expression (20), on en déduit que l'espace des solutions d'un système d'équations linéaires peut être vu comme une intersection d'hyperplans. Et puisque connaître la valeur de ω en chaque élément de $\mathscr{E}$ détermine parfaitement ω, on se rend compte qu'il suffit de savoir construire une base (dite duale) sur E^* pour attaquer ces systèmes d'équations linéaires.

Définition 29 (Base duale)**.** *Soit E de dimension finie n et $\mathscr{E}$ une base de E. Considérons les formes linéaires $\mathscr{O} = \{\theta_1, \dots, \theta_n\}$ définies par $\theta_i(e_k) = \delta_{ik}$. Alors $\mathscr{O}$ est une base de E^*, dite base duale de $\mathscr{E}$.*

Avec cette notion de base sur E^*, on adapte sans problème la définition 14 (indépendance de formes linéaires...).

1.3 Éléments de réduction

1.4 Espace vectoriel normé

1.5 Suites et séries de fonctions

On suit essentiellement les notes de cours de Pierre Maréchal. La question s'était posée de refaire toute cette partie dans un Banach et non nécessairement sur le corps des réels ou celui des complexes. Dans la mesure où aucune démonstration n'est faite dans cette introduction, on voit mal l'intérêt de généraliser si ce n'est pas pour en montrer les détails

4. On n'en n'est pas encore là mais on verra une fructueuse utilisation des formes linéaires via la théorie des distributions. En attendant, on peut lire à dessein l'introduction à la théorie des distributions faite par Pierre-Jean Hormière.

(même s'il aurait pu sembler pertinent de jouer avec des Banach après la partie sur les espaces vectoriels normés (complets)). On réserve alors telle généralisation à un moment plus approprié.

Dans toute la suite de cette sous-partie, on fixe E un ensemble quelconque. Cet ensemble sera l'ensemble de définition de nos fonctions. De plus, on fixe un corps de base k (essentiellement $\mathbf{R}$ ou $\mathbf{C}$). On s'intéresse donc aux applications de E dans k. Cet ensemble de fonctions forme un k-espace vectoriel (pour les lois usuelles).

1.5.1 Suites de fonctions

Définition 30 (Suite de fonctions)**.** *Une suite de fonctions $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ est une suite à valeurs dans k^E. Autrement dit, c'est une application de $\mathbf{N}$ dans k^E.*

De la même manière qu'une suite peut tendre vers un certain scalaire, une suite de fonctions peut tendre vers une certaine fonction (qu'il n'est pas toujours aisé de déterminer).

Définition 31 (Convergence simple)**.** *Soient $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite de fonctions et $f \in k^E$. On dit que $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ converge simplement vers f sur $A \subset E$ lorsque, $\forall x \in A$, on a $f(x) = \lim_{n\to\infty} f_n(x)$.*

On verra par la suite divers modes de convergence. Un particulièrement important (puisqu'il faut apparaître une norme particulièrement importante) est la suivante.

Définition 32 (Convergence uniforme)**.** *Soient $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite de fonctions et $f \in k^E$. On dit que $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ converge uniformément vers f sur $A \subset E$ lorsque :*

$$\forall \epsilon > 0,\ \exists N_\epsilon \in \mathbf{N},\ \forall n \geq N_\epsilon,\ ,\forall x \in A,\ |f_n(x) - f(x)| < \epsilon. \tag{21}$$

Ou, de manière équivalente, lorsque $\|f_n - f\|_{\infty,A}$ tend vers 0 lorsque n tend vers plus l'infini.

La convergence uniforme est plus simple que la convergence simple puisque la première entraîne la seconde.

On peut alors prendre des combinaisons linéaires de suites de fonctions et être en droit d'attendre que la suite de fonction résultante de la combinaison linéaire soit également uniformément convergente ou simplement convergente (vers quelque chose sur un certain domaine) si chacune des suites de fonctions l'était. Tel est bien le cas. Néanmoins, on doit se méfier du produit de deux suites de fonctions. La situation n'est pas la même en fonction du mode de convergence.

Proposition 33. *Soient $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ et $(g_n)_{n\in\mathbf{N}}$ deux suites de fonctions et f et g leur limite respective sur $A \subset E$. Alors :*

1. *la suite de fonctions $(f_n g_n)_{n\in\mathbf{N}}$ converge simplement vers fg sur A.*
2. *la suite de fonction $(f_n g_n)_{n\in\mathbf{N}}$ convergence uniformément vers fg sur A si f et g sont bornés sur A.*

De la même manière qu'avec les suites, on peut étudier la convergence d'une suite de fonctions sans connaître sa limite grâce aux suites uniformément de Cauchy.

Définition 34 (Cauchy uniforme)**.** *Soient $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite de fonctions et $A \subset E$. On dit que $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ est uniformément de Cauchy sur A lorsque*

$$\forall\epsilon>0,\ \exists N_\epsilon\in\mathbf{N},\ \Big(p,q\geq N_\epsilon \implies \sup_A|f_n-f_m|<\epsilon\Big). \tag{22}$$

De la complétude de l'espace étudié, il en résulte une équivalence entre le critère de Cauchy uniforme et l'uniforme convergence. La maîtrise de la convergence permet alors de s'intéresser à des problèmes de continuité.

Théorème 35. *Soient (E,d) un espace métrique, $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite de fonctions de E dans k et $x_0\in E$. Supposons que, pour tout $n\in\mathbf{N}$, f_n soit continue en x_0 et que $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ converge* ***uniformément*** *vers une fonction f sur E. Alors f est continue en x_0.*

On montre désormais divers résultats qui, sous des hypothèses d'uniforme convergence, permettent des interversions de limites.

Théorème 36. *Soient $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite d'applications de E dans k, $A\subset E$ et $\overline{x}$ un point d'accumulation*[5] *de A. Supposons que :*

— *$(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ converge* ***uniformément*** *vers une fonction f sur $A\setminus\{\overline{x}\}$,*

— *pour tout $n\in\mathbf{N}$, $f_n(x)$ tend vers une limite l_n lorsque $x\to\overline{x}$.*

Alors, on a l'égalité des limites suivante :

$$\lim_{x\to\overline{x}}\lim_{n\to\infty}f_n(x)=\lim_{n\to\infty}\lim_{x\to\overline{x}}f_n(x). \tag{23}$$

Théorème 37. *Soit $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite de fonctions k-intégrables sur l'intervalle $[a,b]$ (avec a et b deux réels) qui converge* ***uniformément*** *vers une fonction f sur $[a,b]$. Alors f est k-intégrable sur $[a,b]$ et l'on a l'égalité suivante :*

$$\int_a^b\lim_{n\to\infty}f_n(x)\mathrm{d}x=\lim_{x\to\infty}\int_a^b f_n(x)\mathrm{d}x. \tag{24}$$

Théorème 38. *Soient $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite de fonctions d'un intervalle I de $\mathbf{k}$ dans $\mathbf{k}$. On suppose que la fonction f_n est dérivable pour tout entier naturel n. On suppose de plus que :*

1. *$(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ converge simplement vers une fonction f sur I,*
2. *$(f_n')_{n\in\mathbf{N}}$ converge* ***uniformément*** *sur I.*

Alors f est dérivable sur I et on a :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\lim_{n\to\infty}f_n(x)=\lim_{n\to\infty}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f_n(x). \tag{25}$$

Conséquemment, on peut par ailleurs prouver que $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ est uniformément convergente sur toute partie bornée de I.

5. On pourra essayer d'adapter la définition 4 à ce contexte pour obtenir la définition suivante : un point de A est dit d'accumulation s'il existe une suite d'éléments de A qui tend vers ce point.

1.5.2 Séries de fonctions

On va voir que moyennant l'introduction du concept de sommes partielles, on peut ramener l'étude des séries de fonctions à celle des suites de fonctions.

Définition 39 (Série de fonctions). *Soit $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite de fonctions de E dans k. On appelle série de fonctions la suite de fonctions $\left(\sum_{k=0}^{n} f_k\right)_{n\in\mathbf{N}}$. On la note $\sum f_n$.*

Sans aucun soucis on peut définir le domaine de convergence de la série, la somme de la série ainsi que le reste de la série.

De la même manière que précédemment, on peut définir divers modes de convergence.

Définition 40 (Modes de convergence). *Soit $\sum f_n$ une série de fonctions.*

1. *On dit que $\sum f_n$ converge simplement lorsque, pour tout $x \in E$, la série numérique $\sum f_n(x)$ est convergente.*
2. *On dit que $\sum f_n$ converge uniformément sur $A \subset E$ lorsque la suite de fonctions $\left(\sum f_n\right)_{n\in\mathbf{N}}$ converge uniformément sur A.*
3. *On dit que $\sum f_n$ converge absolument uniformément sur $A \subset E$ lorsque la série $\sum |f_n|$ est uniformément convergente sur A.*
4. *On dit que $\sum f_n$ converge normalement sur $A \subset E$ lorsque la série numérique $\sum \sup_A |f_n|$ est convergente.*

On a alors la chaîne d'implications suivante (sur un domaine $A \subset E$) :

$$\text{converge normalement} \implies \text{converge uniformément absolument} \implies \text{converge uniformément} \tag{26}$$

Ce qui se résume de la manière suivante (grâce au critère de Cauchy qui s'adapte au cas des séries de fonctions) :

$$\sup_A \left| \sum_{n=p}^{q} f_n(x) \right| \leq \sup_A \sum_{n=p}^{q} |f_n(x)| \leq \sum_{n=p}^{q} \sup_A |f_n|. \tag{27}$$

Toujours sous des hypothèses d'uniforme convergence, on peut adapter la règle d'Abel.

Théorème 41 (Règle d'Abel uniforme). *Soient $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ et $(g_n)_{n\in\mathbf{N}}$ deux suites de fonctions de E qui vérifient :*

1. $\exists M \in \mathbf{R},\ \forall n \geq 0, \forall x \in E, \left| \sum_{k=0}^{n} g_k(x) \right| \leq M,$
2. *la série $\sum |f_n - f_{n+1}|$ converge **uniformément** sur E,*
3. *la suite $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ converge **uniformément** vers la fonction nulle sur E.*

Alors, la série $\sum f_n g_n$ converge uniformément sur E.

On peut également retrouver un théorème de convergence pour les suites (de fonctions cette fois-ci) alternées.

Théorème 42. *Soit $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ une suite de fonctions de E dans k telle que :*

1. *pour tout $x \in E$, la suite numérique $(f_n(x))_{n\in\mathbf{N}}$ est monotone,*
2. *la suite $(f_n)_{n\in\mathbf{N}}$ converge **uniformément** vers la fonction nulle sur E.*

Alors la série $\sum(-1)^n f_n$ converge uniformément sur E et pour tous $x \in E$ et $n \in \mathbf{N}$, on a :

$$\left|\sum_{k=n}^{\infty}(-1)^k f_k(x)\right| \leq |f_n(x)|. \tag{28}$$

Toujours sous une hypothèse de convergence **uniforme**, on trouve un résultat similaire au théorème 35 pour les séries de fonctions. De la même manière, on étend les théorèmes 36, 37 et 38.

Concluons finalement sur un lemme particulièrement utile dans la preuve de résultats de la sous-partie suivante. (Les preuves ne figurant pas dans le texte, on demande quelque peu d'imagination de la part du lecteur.)

Lemme 43 (Abel)**.** *Si $z_0 \in \mathbf{C}$ est tel que la suite complexe $(a_n z_0^n)_{n\in\mathbf{N}}$ soit bornée, et si $r \in [0, |z_0|[$, alors la série de fonctions $\sum a_n z^n$ est normalement convergente sur le disque fermé $\overline{D}(0,r)$.*

1.5.3 Séries entières

On traite un cas particulier de séries de fonctions.

Définition 44 (Séries entières)**.** *Une série entière de la variable complexe z est une série de la forme $\sum a_n z^n$ avec $a_n \in \mathbf{C}$. On appelle a_n le coefficient d'ordre n de la série et le coefficient a_0 est également appelé le terme constant.*

Définition 45. *On appelle rayon de convergence de $\sum a_n z^n$ la borne supérieure R de l'ensemble $\{r \geq 0 \mid (a_n r^n)_{n\in\mathbf{N}} \text{ est bornée}\}$. En fonction de la valeur de R, trois cas sont possibles :*

1. *Si $R = 0$, la série ne converge que pour $z = 0$.*
2. *Si $R = \infty$, la série converge absolument pour tout $z \in \mathbf{C}$ et la convergence et normale sur toute partie bornée de $\mathbf{C}$.*
3. *Si $R \in]0, \infty[$, la série converge absolument pour $|z| < R$, diverge pour $|z| > R$ et la convergence est normale sur tout disque $\overline{D}(0,r)$ avec $r < R$.*

Remarquons que sur le bord du disque de convergence (cas trois), on ne peut rien dire en toute généralité.

On dispose de plusieurs moyens concrets de calculer le rayon de convergence.

Théorème 46 (Formule d'Hadamard)**.** *Le rayon de convergence R de la série entière $\sum a_n z^n$ satisfait :*

$$\frac{1}{R} = \limsup_{n\to\infty} |a_n|^{1/n} \tag{29}$$

avec la convention que 0 et ∞ sont inverses l'un de l'autre.

De la même manière que pour les suites, on dispose d'une règle de d'Alembert adaptée aux séries entières. En effet, si la suite $\left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)_{n\in\mathbf{N}}$ tend vers une limite $L \in [0,\infty]$, alors $R = 1/L$.

On trouve ensuite pléiade de résultats qui n'ont rien pour nous étonner. Par exemple, la somme d'une série entière est continue en tout point de son disque de convergence.

Les nouveautés apparaissent lorsque l'on s'intéresse aux fonctions holomorphes sur un ouvert de $\mathbf{C}$. On peut alors montrer qu'une série entière de rayon de convergence R est holomorphe sur $D(0,R)$ (on calcule ensuite aisément sa (p-ième, avec p entier naturel) $\mathbf{C}$-dérivée à l'aide de dérivations formelles). L'intérêt des fonctions holomorphes (pour nous) porte à leur rapport avec les fonctions analytiques. On laisse le développement de ce point à un cours d'analyse complexe. En attendant, on peut tout de même s'amuser. On définit par exemple l'exponentielle complexe $\exp : \mathbf{C} \to \mathbf{C}$ telle que

$$\exp(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!}. \tag{30}$$

Elle possède un rayon de convergence infini et on laisse à plus tard le problème du (des) logarithme(s) complexe(s). On retrouve alors toutes les propriétés usuelles de la fonction exponentielle (continuité, dérivée, périodicité, somme, puissance...). Bien avoir en tête de ne pas se priver des raisonnements géométriques que peut, parfois, permettre le monde complexe.

Jusqu'alors on part de séries entières pour étudier des fonctions. Dans certains cas, il est possible de partir d'une fonction pour montrer qu'elle s'exprime comme une série entière.

Définition 47 (DSE). *Soient Ω un ouvert de k et $f : \Omega \to \mathbf{C}$. On dit que f est développable en série entière en 0 s'il existe une série entière $\sum a_n z^n$ de rayon de convergence $R > 0$ et un voisinage $\mathcal{V}$ de 0 tels que :*

$$\forall z \in \mathcal{V},\ f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n. \tag{31}$$

On dira alors que f est est développable en série entière en $z_0 \in \Omega$ si la fonction $f(z_0 + z)$ est développable en série entière en 0.

On peut alors certaines propriétés de stabilité (somme ou multiplication de développements en série entière (en zéro)). Sous conditions, on peut donner le développement en série entière d'une fonction moyennant connaissance de certaines propriétés de cette fonction.

Théorème 48. *Soient Ω un ouvert de k, z_0 un élément de Ω et $f : \Omega \to \mathbf{C}$. Si f est indéfiniment k-dérivable dans un voisinage U de z_0, on définit la série de Taylor de f en z_0 comme la série entière suivante :*

$$\sum_{n\geq 0} \frac{f^{(n)}(z_0)}{n!}(z - z_0)^n. \tag{32}$$

Si l'on suppose désormais que f est développable en série entière en z_0, on en déduit que f est indéfiniment k-dérivable dans un voisinage $\mathcal{V}$ de z_0 et que la série de Taylor est l'unique développement en série entière de f en z_0.

Notons bien que si la situation est idyllique sur **C**, elle est sujette à précautions sur **R**. En effet, une fonction peut être de classe $\mathscr{C}^\infty$ au voisinage de zéro sans pour autant être développable en série entière en zéro[6]. En supposant qu'une fonction f soit C^∞ et en y ajoutant une hypothèse de bornitude sur la norme infinie de chacune des dérivées n-ième de f, on peut aboutir au fait que f soit développable en série entière.

Enfin, on ne rappelle pas les développements en série entière en zéro usuels puisqu'on les trouve aisément sur internet ou qu'ils se retrouvent (après quelques efforts) à la main.

1.6 Analyse de Fourier

On complète une introduction aux séries de Fourier faite par Julien Royer par la lecture du Stein & Shakarchi – *Fourier analysis, an introduction*.

1.7 Application : atomistique et liaison chimique

Comment mieux nous vendre la matière que la résumer comme suit ? *Vous savez ce que vous faites en dessinant un diagramme d'orbitales moléculaires ? Vous diagonalisez une matrice.* L'atomistique est alors une porte d'entrée rêvée pour faire des mathématiques appliquées en lien avec ce projet. On synthétise alors le cours de Jérôme Cuny (L2, PS). Quelques commentaires ont pu s'ajouter suite à la lecture de l'ouvrage de Mathieu Lewin – *Théorie spectrale et mécanique quantique*.

1.7.1 Introduction à la chimie quantique

Lors du siècle dernier, la physique classique s'est retrouvée impuissante dans diverses situations (effet photoélectrique, dualité onde-corpuscule, rayonnement du corps noir, catastrophe ultraviolette, spectre d'émission des atomes ayant des valeurs discrètes).

La mécanique quantique émerge sous l'impulsion de Max Planck, Albert Einstein, Erwin Schrödinger, Paul Dirac, Werner Heisenberg, Louis de Broglie, Niels Bohr...

Une nouvelle échelle s'impose, la reine des constantes dans ce monde *infiniment* petit est la constante de Planck[7] h ou sa réduite $\hbar$.

La chimie bénéficie de cet essor par la fondation de la chimie quantique. On s'intéresse alors au comportement des électrons (spectroscopie, mécanismes réactionnels, comportement électronique et magnétique des molécules, structure de la matière...).

Un objectif fondamental est alors de résoudre l'équation de Schrödinger $\widehat{H}\Psi = E\Psi$. La fonction d'onde Ψ solution permet de décrire et comprendre la structure électronique d'atomes et de molécules ainsi que leurs propriétés structurales et spectroscopiques. Néanmoins, mis-à-part pour les hydrogénoïdes, cette équation n'admet pas de solution analytique. Nous allons donc devoir approximer (à la fois l'équation et les solutions) !

6. Penser à l'exemple suivant :

$$f(x) = \begin{cases} e^{-1/x^2} & \text{si } x \neq 0, \\ 0 & \text{si } x = 0. \end{cases}$$

7. Que l'on retrouve dans la formulation de la dualité onde-corpuscule sous la forme de la longueur d'onde de de Broglie $\lambda = \dfrac{h}{mv}$, ou encore dans l'inégalité d'Heisenberg $\Delta q \Delta p \geq \dfrac{\hbar}{2}$.

1.7.2 Rudiments de mécanique quantique et d'atomistique

On trouve six postulats fondamentaux (aujourd'hui) uniformément acceptés. Seuls quatre nous intéressent dans ce cours.

Postulat 1. L'état d'un système (d'une ou plusieurs particules) à un instant t est complètement défini par la connaissance de sa fonction d'onde, notée $\Psi(\vec{r},t)$. De ce fait, dans un espace à trois dimensions, la fonction d'onde a $3N+1$ variables, où N est le nombre de particules du système. Ajoutons enfin que la fonction d'onde n'a aucun sens physique (c'est son module au carré qui nous intéressera).

On dira que la fonction d'onde satisfait une condition de normalisation lorsque l'intégrale de $\Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$ sur tout l'espace est égale à 1. (Traduction physique : la probabilité de trouver la ou les particules dans toute l'espace est de 1.) À cela s'ajoutent d'agréables propriétés de la fonction d'onde : elle est continue, dérivable, de carré sommable et sa dérivée première est continue et également dérivable.

Postulat 2. À toute grandeur physique A mesurable correspond un opérateur linéaire hermitien noté $\widehat{A}$. On ne définit pas précisément ce que l'on entend par opérateur. Restons pour l'instant avec l'idée que c'est une application linéaire (sur, intuitivement, l'espace des fonctions d'onde).

Dans certains cas, appliquer un opérateur $\widehat{A}$ à une fonction d'onde Ψ peut donner des égalités du type $\widehat{A}\Psi = \lambda\Psi$ avec λ un scalaire (la valeur propre de $\widehat{A}$ et Ψ le vecteur propre de $\widehat{A}$ associé à la valeur propre λ). On peut également avoir le problème inverse et chercher à résoudre cette équation : on parle d'équation aux valeurs propres.

Définition 49 (Dégénérescence)**.** *Soit un opérateur agissant sur deux fonctions propres différentes. On dit que les fonctions propres sont dégénérées si elles admettent la même valeur propre.*

Remarquons que l'on peut combiner les opérateurs (en les sommant ou bien en les composant). En règle générale, les opérateurs ne commutent pas (ils ne commutent que si leur commutateur est nul). Dans le cas où deux opérateurs commutent, ils admettent le même ensemble de fonctions propres (et inversement, si deux opérateurs admettent le même ensemble de fonctions propres alors ils commutent).

En mécanique quantique, tout opérateur peut être construit à partir des opérateurs position et quantité de mouvement : c'est le principe de correspondance. L'opérateur position $\widehat{q_i}$ associé à une coordonnée q_i ($q_i = x, y$ ou z) consister à multiplier par la variable. Soit une fonction f, alors $\widehat{q_i}f = q_i f$ (multiplication usuelle). L'opérateur quantité de mouvement $\widehat{p_j}$ associé à la coordonnée q_j consister à dériver par rapport à cette coordonnée puis à multiplier par $-i\hbar$. Soit une fonction f, alors $\widehat{p_j}f = -i\hbar\dfrac{\partial f}{\partial q_j}$.

Remarquons que dans le cas tridimensionnel, l'opérateur quantité de mouvement s'écrit sous la forme suivante $\widehat{p} = -i\hbar\left(\dfrac{\partial}{\partial x} + \dfrac{\partial}{\partial y} + \dfrac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\nabla$. Toujours pour une onde tridimensionnelle, l'opérateur énergie cinétique $\widehat{T}$ se décompose de la manière suivante $\widehat{T} =$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$. On peut alors construire l'opérateur hamiltonien $\widehat{H}=\widehat{T}+\widehat{V}$, somme de l'opérateur énergie cinétique et du potentiel.

Postulat 3. L'évolution de l'état d'un système est régie par l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$\widehat{H}\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}. \tag{33}$$

Lorsque l'on néglige le temps (système dans un état stationnaire), on obtient l'équation de Schrödinger qui nous intéresse $\widehat{H}\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r})$.

Postulat 4. Les valeurs de A mesurables expérimentalement ne peuvent être que les valeurs propres de l'opérateur associé $\widehat{A}$.

1.7.3 Des orbitales atomiques aux orbitales moléculaires

1.7.4 Méthode de Hückel

1.7.5 Symétrie moléculaire

1.7.6 Introduction aux méthodes *ab-initio*

2 ...