Rappels mathématiques pour la mécanique quantique

Bruno Figliuzzi

1 Espaces de Hilbert

1.1 Définitions

Soit H un espace vectoriel sur un corps $\mathbb{K}$ (avec $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ ou $\mathbb{R}$).

Définition 1.1 (Produit scalaire)**.** Un produit scalaire sur H est une application $f : H \times H \to \mathbb{R}$ bilinéaire, symétrique et définie positive :

1. $\forall (x, y) \in H \times H, f(x, y) = \overline{f(y, x)}$,
2. $\forall (x, y, z) \in H \times H \times H, \forall (\lambda, \mu) \in \mathbb{K} \times \mathbb{K}, f(\lambda x + \mu y, z) = \lambda f(x, z) + \mu f(y, z)$,
3. $\forall x \in H, f(x, x) \geq 0$,
4. $\forall x \in H, f(x, x) = 0$ si et seulement si $x = 0$.

On note $\langle x|y\rangle = f(x, y)$ le produit scalaire.

Il est possible d'associer au produit scalaire $\langle \cdot|\cdot \rangle$ la norme $\|x\| = \sqrt{\langle x|x\rangle}$. Cette norme est appelée norme hilbertienne associée au produit scalaire $\langle \cdot|\cdot \rangle$.

Définition 1.2 (Espace de Hilbert)**.** Un espace vectoriel H muni d'un produit scalaire est appelé un espace préhilbertien. Un espace préhilbertien H complet pour la norme associée au produit scalaire est appelé un espace de Hilbert. On rappelle qu'un espace vectoriel normé H est complet si toute suite de Cauchy pour la norme associée $\| \cdot \|$ est convergente.

Les espaces de Hilbert sont fondamentaux dans la description mathématique de la mécanique quantique. L'ensemble des états possibles d'un système quantique est en effet représenté par un espace de Hilbert H, l'état du système étant défini à chaque instant par un vecteur $x \in H$ de norme unitaire.

1.2 Propriétés élémentaires

Le produit scalaire défini sur un espace préhilbertien vérifie l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

Lemme 1.1 (Inégalité de Cauchy-Schwarz)**.**

$$\forall x, y \in H, |\langle x|y\rangle| \leq \|x\|\|y\|. \tag{1}$$

Un corollaire immédiat de l'inégalité de Cauchy-Schwarz est l'inégalité de Minkowski, qui prouve que la norme associée au produit scalaire $\langle \cdot|\cdot \rangle$ vérifie bien l'inégalité triangulaire.

Corollaire 1.1 (Inégalité de Minkowski)**.**

$$\forall x, y \in H, |\langle x|y\rangle| \leq \|x\|\|y\|. \tag{2}$$

Un autre résultat fondamental est donné par le théorème de Riesz ci-dessous :

Théorème 1.1 (Théorème de Riesz)**.** *Soit $\Psi : H \to H$ une forme linéaire sur H. Alors, il existe un unique vecteur $x \in H$ tel que, $\forall y \in H$,*

$$\Psi(y) = \langle x|y\rangle .$$

En d'autres termes, toute forme linéaire sur un espace de Hilbert peut s'exprimer sous forme d'un produit scalaire avec un unique vecteur de cet espace.

1.3 Théorème de projection et bases hilbertiennes

Définition 1.3 (Orthogonal d'une partie de H)**.** Deux éléments non nuls x et y de H sont dits orthogonaux si $\langle x|y\rangle = 0$.
Soit $F \subset H$. L'orthogonal de F, noté $F^\perp$, est l'ensemble

$$F^\perp = \{x \in H; \langle x|y\rangle = 0, \forall y \in F\}. \tag{3}$$

On vérifie aisément que $F^\perp$ est un sous-espace vectoriel fermé de H.

Théorème 1.2 (Projection sur un convexe fermé)**.** *Soit F un convexe fermé non vide d'un espace de Hilbert H. Alors,*

1. *$\forall x \in H$, il existe un unique élément $u \in F$ tel que*

$$\|x - u\| = \inf_{v \in F} \|x - v\|.$$

Cet élément est la projection de x sur F, et sera noté $\Pi_F(x)$.

2. *$u = \Pi_F(x)$ si et seulement si $u \in F$ et la partie réelle de $\langle x - u | y - v \rangle$ est négative pour tout $v \in F$.*
3. *La projection sur F est $1-$lipschitzienne :*

$$\|\Pi_F(x) - \Pi_F(y)\| \leq \|x - y\|, \forall x, y \in H.$$

Un cas particulier important du théorème de projection sur un convexe fermé concerne la projection sur un sous-espace vectoriel fermé de H. Soit ainsi F un sous-espace vectoriel fermé de H. Alors, on vérifie :

1. $\Pi_F \circ \Pi_F = \Pi_F$
2. $\forall x \in H, x = \Pi_F(x) + (x - \Pi_F(x))$, avec $x - \Pi_F(x) \in F^\perp$: H est la somme orthogonale de F et de $F^\perp$.
3. Π_F est une application linéaire, et $\Pi_{F^\perp} = I - \Pi_F$.

1.3.1 Base Hilbertienne

Définition 1.4. Soit H un espace de Hilbert et soit J un ensemble dénombrable. Une famille $(e_j)_{j \in J}$ de vecteurs de H est orthonormée si :

$$\forall i, j \in J, \langle e_i | e_j \rangle = \begin{cases} 1 \text{ si } i = j \\ 0 \text{ si } i \neq j. \end{cases}$$

Définition 1.5 (Base orthonormée de H)**.** Soit $(e_j)_{j \in J}$ une famille orthonormée de vecteurs de H. Si de plus $(e_j)_{j \in J}$ est dense dans H, alors cette famille est une base hilbertienne de H.

Etant donnée une base hilbertienne de vecteurs de H, le théorème de projection permet de prouver le résultat qui suit :

Théorème 1.3. *Soit $(e_j)_{j \in J}$ une famille orthonormée d'un espace de Hilbert H de dimension finie ou infinie. Alors :*

1. *$\forall x \in H$, $\|x\|^2 = \sum_{j \in J} | \langle x | e_j \rangle |^2$ (relation de Parseval)*
2. *$\forall x, y \in H$, $\langle x | y \rangle = \sum_{j \in J} \langle x | e_j \rangle \overline{\langle y | e_j \rangle}$.*
3. *$\forall x \in H$, $x = \sum_{j \in J} \langle x | e_j \rangle e_j$ dans H.*

1.4 Opérateur hermitien

Définition 1.6 (Opérateur hermitien)**.** Soit H un espace de Hilbert. Une opérateur $\hat{A}$ sur H est une application linéaire de H vers lui-même. Un opérateur $\hat{A}$ est dit hermitien si, pour tout couple x, y de vecteurs de H :

$$\langle \hat{A} x | y \rangle = \langle x | \hat{A} y \rangle .$$

Si A est la matrice correspondant à l'opérateur $\hat{A}$ dans une base orthonormée de H, A est égale à la transposée de sa conjuguée :

$$^t\bar{A} = A.$$

Dans la description mathématique de la mécanique quantique, les opérateurs hermitiens jouent un rôle fondamental car ils représentent les grandeurs physiques (position, impulsion, énergie, etc.). Les valeurs propres réelles de l'opérateur représentent les valeurs possibles de la grandeur physique considérée, les vecteurs propres correspondant quant à eux aux états associés du système quantique.

Théorème 1.4 (Théorème spectral)**.** *Si $\hat{A}$ est un opérateur hermitien sur un espace de Hilbert H, alors il existe une base hilbertienne de H constituée de vecteurs propres de $\hat{A}$.*

Le théorème spectral consitue un résultat fondamental. Considérons ainsi un système quantique dont les états possibles sont représentés par un espace de Hilbert H, et supposons que l'état du système soit représenté par un vecteur $x \in H$. Soit $\hat{A}$ un opérateur hermitien sur H représentant une grandeur physique. D'après le théorème spectral, il existe une base orthonormée $\{\varphi_i, i \in I\}$ de H constituée de vecteurs propres de $\hat{A}$. On peut donc exprimer l'état x du système quantique sous la forme

$$x = \sum_{i \in I} \langle x|\varphi_i\rangle \, \varphi_i.$$

En appliquant la relation de Parseval, on vérifie que

$$\sum_{i \in I} |\langle x|\varphi_i\rangle|^2 = 1$$

et que

$$|\langle x|\varphi_i\rangle|^2 \leq 1, \forall i \in I.$$

On peut donc interpréter physiquement la quantité $|\langle x|\varphi_i\rangle|^2$ comme étant la probabilité que le système physique soit dans l'état φ_i correspondant à la valeur a_i de la grandeur physique représentée par l'opérateur hermitien $\hat{A}$.

2 L'espace $L^2(\mathbb{R})$

On note $L^2(\mathbb{R})$ l'espace [1]

$$L^2(\mathbb{R}) = \{f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, |f|^2 \text{ est intégrable sur } \mathbb{R}\}.$$

1. La définition proposée ici n'est pas rigoureusement exacte, mais sera précisée dans l'UE de mathématiques fondamentales avec l'introduction de la théorie de la mesure.

et on note $\|\cdot\|_{L^2}$ la norme définie pour tout $f \in L^2(\mathbb{R})$ par

$$||f||_{L^2} := \left(\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \mathrm{d}x\right)^{1/2}.$$

L'espace $L^2(\mathbb{R})$ muni du produit scalaire

$$\langle f|g\rangle = \int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{g(x)}\mathrm{d}x$$

est un espace de Hilbert et vérifie donc les propriétés rappelées dans la section précédente de ce document :

Théorème 2.1 (Inégalité de Cauchy-Schwarz)**.** *Si $f \in L^2(\mathbb{R})$ et si $g \in L^2(\mathbb{R})$, alors le produit $f\bar{g}$ est intégrable, et*

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)\bar{g}(x)|\mathrm{d}x = \|f\|_{L^2}\|g\|_{L^2}.$$

Théorème 2.2 (Théorème de Riesz)**.** *Soit $\Psi : L^2(\mathbb{R}) \to \mathbb{R}$ une forme linéaire sur $L^2(\mathbb{R})$. Alors, il existe une fonction $f \in L^2(\mathbb{R})$ telle que, $\forall g \in L^2(\mathbb{R})$,*

$$\Psi(g) = \langle f|g\rangle\,.$$

L'espace $L^2(\mathbb{R})$ joue un rôle particulièrement important en mécanique quantique, au travers de la notion de **fonction d'onde**. La fonction d'onde d'un système quantique est une représentation de l'état quantique de ce système dans une base de dimension infinie, souvent celle de ses positions possibles. Connaissant la fonction d'onde d'un système quantique donné, il est possible de calculer la probabilité de présence du système autour de la position x en évaluant la quantité $|\Psi(x)|^2$. Correctement normalisés, les carrés des fonctions de $L^2(\mathbb{R})$ peuvent en effet s'interpréter comme des **densités de probabilité**. Soit ainsi f une fonction de carré intégrable sur $\mathbb{R}$. Nécessairement, $|f|^2$ est positive et est par définition intégrable sur $\mathbb{R}$, d'intégrale

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \mathrm{d}x := \|f\|_{L^2}.$$

On en déduit immédiatement que la fonction

$$x \to \|f(x)|^2/\|f\|_{L^2}$$

peut s'interpréter comme une densité de probabilité sur $\mathbb{R}$. En conséquence, si on connait la fonction d'onde en position d'un système quantique, la moyenne $\bar{P}$ d'une quantité physique P s'exprime de la manière suivante :

$$\bar{P} = \int_{\mathbb{R}} P(x)|\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x.$$

De même, la variance de cette même quantité prend la forme

$$\sigma_P := \int_{\mathbb{R}} (P(x) - \bar{P})^2 |\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x.$$

A titre d'exemple, la position moyenne d'un système dont la position est décrite par la fonction d'onde Ψ est

$$\bar{x} = \int_{\mathbb{R}} x|\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x.$$

3 Transformation de Fourier

3.1 Transformation de Fourier des fonctions intégrables

On note $L^1(\mathbb{R})$ l'espace

$$L^1(\mathbb{R}) = \{f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, |f| \text{ est intégrable sur } \mathbb{R}\}.$$

des fonctions intégrables.

Définition 3.1 (Transformée de Fourier)**.** Soit f une fonction intégrable. Pour tout $\xi \in \mathbb{R}$, la fonction $x \to f(x)e^{-i\xi x}$ est intégrable, et la quantité

$$\hat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x)e^{-i\xi x} \mathrm{d}x.$$

est donc bien définie pour tout $\xi \in \mathbb{R}$. La fonction $\xi \in \mathbb{R} \to \hat{f}(\xi)$, que nous noterons indifféremment $\hat{f}$ ou $\mathcal{F}f$ dans la suite, est appelée **transformée de Fourier** de f.

Dans la littérature, on utilise souvent la dénomination de variable spatiale, temporelle ou physique pour désigner la variable x et de variable fréquentielle ou de Fourier pour désigner la variable ξ. De la même manière, on emploie souvent les termes d'espace physique et d'espace de Fourier pour désigner les espaces d'appartenance respectifs des variables x et ξ. Néanmoins, d'un point de vue purement mathématique, il n'y a pas lieu d'établir de distinction entre l'espace physique et l'espace de Fourier. On peut ainsi tout à fait calculer la transformée de Fourier d'une fonction définie dans l'espace de Fourier.

3.1.1 Exemples

1. *Transformée de Fourier d'une fonction indicatrice* Pour tout $a > 0$, considérons la fonction $f_a = \mathbb{1}_{[-a,a]}$. On peut calculer la transformée de

Fourier de f en revenant à la définition. Un calcul élémentaire donne alors :

$$\forall \xi \in \mathbb{R}, \hat{f}(\xi) := \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{[-a,a]}(x) e^{-\xi x} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(a\xi)}{\xi}.$$

2. *Transformée de Fourier d'une fonction gaussienne* On peut montrer que la transformée de Fourier d'une fonction gaussienne est elle-même une fonction gaussienne. Plus précisément, on a, pour tout réel $a > 0$:

$$\forall \xi \in \mathbb{R}, \mathcal{F}(x \to e^{-ax^2})(\xi) = \sqrt{\frac{1}{2a}} e^{-\frac{\xi^2}{4a}}.$$

3. *Transformée de Fourier d'un pic de Dirac* La transformée de Fourier d'un pic de Dirac δ est égale à la fonction constante de valeur 1.

La transformation de Fourier vérifie un certain nombre de propriétés de calcul, détaillées dans la proposition qui suit.

Proposition 3.1 (Propriétés de calculs de la transformation de Fourier)**.** *Soit $f \in L^1(\mathbb{R})$.*

1. $\forall a \in \mathbb{R}, \mathcal{F}(x \to f(x+a))(\xi) = e^{ia\xi} \hat{f}(\xi)$ *: une translation dans l'espace physique se traduit par un décalage de phase dans l'espace fréquentiel.*
2. *Réciproquement,* $\forall a \in \mathbb{R}, \mathcal{F}(x \to e^{-iax} f(x))(\xi) = \hat{f}(\xi + a)$ *: un décalage de phase dans l'espace physique se traduit par une translation dans l'espace fréquentiel.*
3. $\forall \delta > 0, \mathcal{F}(x \to f(x/\delta))(\xi) = \delta \hat{f}(\delta \xi)$ *: dilater la fonction dans l'espace physique par un facteur $\delta > 0$ revient à dilater (et renormaliser) sa transformée de Fourier par le facteur $1/\delta$.*

Théorème 3.1 (Théorème d'inversion dans $L^1(\mathbb{R})$)**.** *La transformation de Fourier est injective de $L^1(\mathbb{R})$ dans $C_0(\mathbb{R})$, l'espaces des fonctions continues sur $\mathbb{R}$ et qui tendent vers 0 en $\pm\infty$. De plus, si $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R})$, alors, pour presque tout $x \in \mathbb{R}$, on vérifie*

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(\xi) e^{i\xi x} \mathrm{d}\xi.$$

Autrement dit, on a

$$f = \bar{\mathcal{F}}(\mathcal{F} f),$$

où $\bar{\mathcal{F}}$ désigne la transformée de Fourier inverse, définie pour toute fonction $f \in L^1(\mathbb{R})$ par

$$\bar{\mathcal{F}} f(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(x) e^{i\xi x} \mathrm{d}x = \mathcal{F} f(-\xi).$$

3.1.2 Transformation de Fourier et dérivation

La transformation de Fourier possède des propriétés intéressantes vis à vis des opérations de dérivation, énoncées dans la proposition qui suit :

Proposition 3.2. *Soit $f \in C^1(\mathbb{R})$. On suppose que la dérivée f' de f est intégrable ($f' \in L^1(\mathbb{R})$). Alors, $\forall \xi \in \mathbb{R}$,*

$$\widehat{f'}(\xi) = i\xi \hat{f}(\xi). \tag{4}$$

3.2 Transformation de Fourier sur $L^2(\mathbb{R})$

Dans le cas général, si $f \in L^2(\mathbb{R})$, il est impossible de donner un sens à l'expression

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)e^{-ix\xi}\mathrm{d}x.$$

Rien ne garantit en effet l'intégrabilité de la fonction $x \to f(x)e^{-ix\xi}$ sur $\mathbb{R}$. Cependant, cette expression garde un sens si on se restreint aux fonctions de $L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$. On peut alors montrer que la transformation de Fourier définie sur $L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ peut se prolonger en un application linéaire, continue et bijective de $L^2(\mathbb{R})$ dans lui-même.

Théorème 3.2 (Théorème de Plancherel)**.** *La transformation de Fourier $\mathcal{F}$ est un automorphisme continu de $L^2(\mathbb{R})$, de bijection réciproque l'application $\mathcal{F}^{-1} = \mathcal{F} \circ s$, où $s : f \to f(-\cdot)$. De plus, on vérifie :*

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}), \qquad \|\mathcal{F}f\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|f\|_2 \qquad \textit{(égalité de Plancherel)}$$

$$\forall f, g \in L^2(\mathbb{R}), \quad \textstyle\int_{\mathbb{R}} \mathcal{F}f(\xi)\overline{\mathcal{F}g}(\xi)\mathrm{d}\xi = \int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{g(x)}\mathrm{d}x.$$

Une conséquence fondamentale du théorème de Plancherel est que la transformation de Fourier conserve la norme des fonctions de $L^2(\mathbb{R})$. En particulier, si $|f|^2$ est une densité de probabilité sur $\mathbb{R}$, alors la quantité $|\mathcal{F}f|^2$ est également une densité de probabilité sur l'espace de fréquentiel.