Introduction aux espaces de Hilbert

I – Algèbre complexe et notations de Dirac

- Soit $\mathcal{E}_N$ un espace vectoriel de dimension N dont une base est $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \ldots, \vec{u}_N\}$. Tout vecteur $\vec{\psi}$ de $\mathcal{E}_N$ peut se décomposer comme suit dans cette base

$$\vec{\psi} = \sum_{i=1}^{N} \psi_i \vec{u}_i = \psi_1 \vec{u}_1 + \psi_2 \vec{u}_2 + \cdots + \psi_N \vec{u}_N$$

- Jusqu'à maintenant, les nombres $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N$ étaient des nombres réels
- Dans la suite, on s'autorisera à utiliser des nombres complexes :

si $\alpha \in \mathbb{C}$, $\alpha = a + ib$ où a et b sont des nombres réels

et $i^2 = -1$

$\mathbb{C}$: ensemble des nombres complexes

$a = \mathrm{Re}(\alpha)$ est la partie réelle de α

$b = \mathrm{Im}(\alpha)$ est la partie imaginaire de α

Notation : (1) $\alpha^* = a - ib$ est le nombre complexe conjugué de α.

(2) $\boxed{\alpha \in \mathbb{R} \Leftrightarrow b = 0 \Leftrightarrow \alpha^* = \alpha}$

(3) $\alpha\alpha^* = \alpha^*\alpha = (a+ib)(a-ib) = a^2 + b^2 = |\alpha|^2$

module au carré de α

- Notation de Dirac : pour éviter toute confusion avec les espaces vectoriels réels, les vecteurs ne seront plus notés avec des flèches mais avec des "kets"

$$\vec{\psi} \longrightarrow |\psi\rangle$$

$$\vec{u}_i \longrightarrow |u_i\rangle$$

Ainsi, on écrira

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \psi_i |u_i\rangle}$$

II – Produit scalaire complexe

Par définition, le produit scalaire entre deux kets vérifie les propriétés suivantes

(1) $\langle\psi|\psi\rangle = \underbrace{\|\psi\|^2}_{\text{norme au carré du ket } |\psi\rangle} \geq 0$

(2) $\langle\psi|\chi\rangle = \underbrace{\langle\chi|\psi\rangle^*}_{\text{complexe conjugué de } \langle\chi|\psi\rangle}$

(3) $\forall \alpha \in \mathbb{C}$
$\langle\psi|\alpha\chi\rangle = \alpha\langle\psi|\chi\rangle$

(4) $\langle\psi|\chi + \Phi\rangle$
$= \langle\psi|\chi\rangle + \langle\psi|\Phi\rangle$

- Conséquences de (2) et (3) :

$$\langle \alpha\psi|\chi\rangle = \langle \chi|\alpha\psi\rangle^* = \big(\alpha\langle\chi|\psi\rangle\big)^* = \alpha^*\langle\chi|\psi\rangle^*$$

donc
$$\boxed{\langle \alpha\psi|\chi\rangle = \alpha^*\langle\psi|\chi\rangle} \quad (5)$$

- Un produit scalaire ayant les propriétés (3) et (5) est dit sesquilinéaire (à gauche)

- Conséquences de (2) et (4) :

$$\langle \psi+\Phi|\chi\rangle = \langle\chi|\psi+\Phi\rangle^* = \big(\langle\chi|\psi\rangle + \langle\chi|\Phi\rangle\big)^* = \langle\chi|\psi\rangle^* + \langle\chi|\Phi\rangle^*$$

d'où
$$\boxed{\langle\psi+\Phi|\chi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle + \langle\Phi|\chi\rangle}$$

Un espace vectoriel muni d'un tel produit scalaire est appelé espace de Hilbert.

III – Bra, base orthonormée et résolution de l'identité

- Soit $|\psi\rangle$ un ket de $\mathcal{E}_N$. On appelle "bra" associé à $|\psi\rangle$ la forme linéaire définie comme suit :

"bra ψ"

$$\underset{\mathcal{E}_N}{|\chi\rangle} \xrightarrow{\langle\psi|} \underset{\mathbb{C}}{\langle\psi|\chi\rangle}$$

- $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_N\rangle\}$ est une base orthonormée

$$\Longleftrightarrow \quad \langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \begin{cases} \to 0 & \text{si } i\neq j \\ \to 1 & \text{si } i=j \end{cases}$$

- $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}_N$, si $\{|u_i\rangle\}_{i=1,\dots,N}$ est une base orthonormée

alors
$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N}\psi_i|u_i\rangle \longrightarrow \langle u_k|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N}\psi_i\underbrace{\langle u_k|u_i\rangle}_{\delta_{ki}}$$

d'où
$$\boxed{\psi_k = \langle u_k|\psi\rangle}$$

Ainsi
$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N}\langle u_i|\psi\rangle|u_i\rangle = \sum_{i=1}^{N}\underbrace{|u_i\rangle}_{\text{ket}}\underbrace{\langle u_i|\psi\rangle}_{\text{nombre complexe}} = \sum_{i=1}^{N}\Big(\underbrace{|u_i\rangle\langle u_i|}_{\text{opérateur qui à } |\psi\rangle \text{ associe } \langle u_i|\psi\rangle|u_i\rangle}\Big)|\psi\rangle$$

Soit
$$|\psi\rangle = \Big(\sum_{i=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i|\Big)|\psi\rangle$$

Conclusion:
$$\boxed{\sum_{i=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i| = \hat{E} = \hat{\mathbb{1}}} \quad (6)$$

opérateur identité

notation

L'équation (6) est connue sous le nom de "résolution de l'identité".

Remarque :

$$\langle\psi|\psi\rangle = \underbrace{\langle\psi|\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle} = \langle\psi|\left(\sum_{i=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i|\right)|\psi\rangle$$

notation : produit scalaire de $|\psi\rangle$ avec $\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\langle\psi|u_i\rangle}_{\psi_i^*} \underbrace{\langle u_i|\psi\rangle}_{\psi_i}$$

soit $$\boxed{\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} |\psi_i|^2}$$

Plus généralement :

si $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \psi_i |u_i\rangle$

$|\chi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \chi_i |u_i\rangle \longrightarrow \langle u_j|\chi\rangle = \chi_j$

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\chi|\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\underbrace{\langle\chi|u_i\rangle}_{\langle u_i|\chi\rangle^*}}_{\chi_i^*} \underbrace{\langle u_i|\psi\rangle}_{\psi_i}$$

d'où $$\boxed{\langle\chi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \chi_i^* \psi_i}$$

IV – Opérateurs linéaires et représentation matricielle

- Un opérateur $\hat{A}$ agit sur un ket $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}_N$ et le transforme en un nouveau ket noté $\hat{A}|\psi\rangle$

$$\underset{\mathcal{E}_N}{|\psi\rangle} \xrightarrow{\hat{A}} \underset{\mathcal{E}_N}{\hat{A}|\psi\rangle}$$

- Par définition, un opérateur linéaire est tel que

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{A}(|\psi\rangle + |\chi\rangle) &= \hat{A}|\psi\rangle + \hat{A}|\chi\rangle \\ \hat{A}(\alpha|\psi\rangle) &= \alpha\hat{A}|\psi\rangle \quad \text{où } \alpha \in \mathbb{C} \end{aligned}}$$

- Si $\{|u_i\rangle\}_{i=1,\dots,N}$ est une base orthonormée de $\mathcal{E}_N$

alors $$\hat{A}|u_j\rangle = \hat{\mathbb{1}}\hat{A}|u_j\rangle = \left(\sum_{i=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i|\right)\hat{A}|u_j\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle |u_i\rangle$$

Par conséquent, la représentation matricielle de $\hat{A}$ dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_N\rangle\}$ s'écrit

$$[\hat{A}] = \underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} \langle u_1|\hat{A}|u_1\rangle & \cdots & \langle u_1|\hat{A}|u_N\rangle \\ \langle u_2|\hat{A}|u_1\rangle & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \langle u_N|\hat{A}|u_1\rangle & \cdots & \langle u_N|\hat{A}|u_N\rangle \end{bmatrix}$$

soit $\boxed{A_{ij} = \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle}$

V_ Opérateur adjoint

- Soit $\hat{A}$ un opérateur linéaire dans $\mathcal{E}_N$.

Par définition, l'opérateur adjoint de $\hat{A}$ (noté $\hat{A}^\dagger$) est tel que

$\forall |\psi\rangle, \forall |\chi\rangle,$ $\boxed{\langle \psi | \hat{A} | \chi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle^*}$

- Représentation matricielle de $\hat{A}^\dagger$:

$$[\hat{A}^\dagger]_{ij} = \langle u_i | \hat{A}^\dagger | u_j \rangle = \left(\langle \hat{A}^\dagger u_j | u_i \rangle \right)^*$$
$$= \left(\langle u_j | \hat{A} | u_i \rangle \right)^* = A_{ji}^*$$

Ainsi $[\hat{A}^\dagger]_{ij} = \left(\underline{\underline{A}}^T \right)^*_{ij} \rightarrow \boxed{[\hat{A}^\dagger] = \left(\underline{\underline{A}}^T \right)^*}$

matrice trans-conjuguée de $\underline{\underline{A}}$.

Par extension, il est courant de noter $\underline{\underline{A}}^\dagger$ la trans-conjuguée de $\underline{\underline{A}}$ et de l'appeler matrice adjointe de $\underline{\underline{A}}$.

- $\boxed{\hat{A} \text{ hermitien (ou hermitique ou auto-adjoint)} \Leftrightarrow \hat{A}^\dagger = \hat{A}}$

Par extension, on dira que $\underline{\underline{A}}$ est hermitienne si et seulement si

$$\underline{\underline{A}}^\dagger = \underline{\underline{A}}$$

Remarque : en algèbre réel, "hermitien" est équivalent à "symétrique" puisque $\underline{\underline{A}}^\dagger = (\underline{\underline{A}}^T)^* = \underline{\underline{A}}^T$

- $\boxed{\hat{A} \text{ unitaire} \Leftrightarrow \hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}}$

opérateur inverse de $\hat{A}$

Par extension, on dira que $\underline{\underline{A}}$ est unitaire si et seulement si

$$\underline{\underline{A}}^\dagger = \underline{\underline{A}}^{-1}$$

Remarque : en algèbre réel, "unitaire" est équivalent à "orthonormée" puisque $\underline{\underline{A}}^{-1} = \underline{\underline{A}}^\dagger = (\underline{\underline{A}}^T)^* = \underline{\underline{A}}^T$

VI – Valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur hermitien.

- Soit $\hat{H}$ un opérateur hermitien
- Les valeurs propres de $\hat{H}$ sont des nombres réels.

Preuve : Soit a une valeur propre de $\hat{H}$.

Il existe un ket non nul $|\psi_a\rangle$ tel que

$\hat{H}|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle \leftarrow$ définition d'une valeur propre !

Ainsi $\langle\psi_a|\hat{H}|\psi_a\rangle = a\langle\psi_a|\psi_a\rangle$

et $\underbrace{\langle\psi_a|\hat{H}|\psi_a\rangle^*}_{\langle\hat{H}\psi_a|\psi_a\rangle} = a^* \underbrace{\langle\psi_a|\psi_a\rangle^*}_{\langle\psi_a|\psi_a\rangle}$

or $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ donc $\langle\hat{H}\psi_a|\psi_a\rangle = \langle\hat{H}^\dagger\psi_a|\psi_a\rangle$

$= \langle\psi_a|\hat{H}|\psi_a\rangle$

D'où $a^*\langle\psi_a|\psi_a\rangle = a\langle\psi_a|\psi_a\rangle$

$\rightarrow (a^*-a)\underbrace{\langle\psi_a|\psi_a\rangle}_{\neq 0} = 0$

donc $\boxed{a^* = a} \Rightarrow a \in \mathbb{R}$.

- Deux kets propres de $\hat{H}$ associés à deux valeurs propres différentes sont orthogonaux.

Preuve : Soient $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_b\rangle$

2 kets propres de $\hat{H}$ associés aux valeurs propres a et b, respectivement.

$\hat{H}|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle$

$\hat{H}|\psi_b\rangle = b|\psi_b\rangle$.

Ainsi $\langle\psi_a|\hat{H}|\psi_b\rangle = b\langle\psi_a|\psi_b\rangle$

$= \langle\hat{H}^\dagger\psi_a|\psi_b\rangle$

$= \langle\hat{H}\psi_a|\psi_b\rangle$

$= a^*\langle\psi_a|\psi_b\rangle$

$= a\langle\psi_a|\psi_b\rangle$

d'où $(b-a)\langle\psi_a|\psi_b\rangle = 0$

si $b \neq a$ alors $\boxed{\langle\psi_a|\psi_b\rangle = 0}$

- On peut ainsi montrer qu'il existe toujours une base orthonormée de $\mathcal{E}_N$ composée uniquement de vecteurs propres de $\hat{H}$.