Les harmoniques sphériques :
quand l'algèbre et la géométrie rejoignent la physique et les EDP

Rémy Oudompheng

8 janvier 2010

Introduction

Sur une variété riemannienne, comme la sphère, on peut définir un opérateur « laplacien » Δ, qui généralise le laplacien habituel de l'espace euclidien $\mathbb{R}^n$. Cet opérateur intervient de manière essentielle dans trois équations simples :

$$\begin{array}{ll} \text{l'équation de la chaleur} & \dfrac{\partial f}{\partial t} = \Delta f \\ \text{l'équation des ondes} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \Delta f \\ \text{l'équation de Schrödinger} & i\hbar\dfrac{\partial f}{\partial t} = \Delta f \end{array}$$

L'étude des valeurs propres du laplacien et des fonctions propres associées permet de donner un certani nombre de solutions fondamentales de ces EDP. Elle permet aussi d'étudier de manière élégante un certain nombre de problèmes plus abstraits, comme la cohomologie, à travers le théorème de l'indice et les travaux de Quillen-Bismut-Lebeau.

Dans le cas de la sphère, la notion de symétrie et de groupe de Lie permet d'étudier ce problème d'un point de vue purement algébrique.

1 Un problème de valeurs propres

1.1 Laplacien sphérique

Le laplacien sur la sphère unité peut être défini de manière concise à l'aide des trois opérateurs de rotation élémentaire :

$$L_x = y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}$$
$$L_y = z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}$$
$$L_z = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}$$

et de la formule

$$\Delta\psi = (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)(\psi)$$

En effet, de la formule

$$\begin{aligned} L_x^2 &= y^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} - y\frac{\partial}{\partial y} - 2yz\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial z} \\ &= (y^2+z^2)\Big(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big) - \Big(y\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial z}\Big)^2 \end{aligned}$$

On tire

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = (x^2+y^2+z^2)\Big(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)$$
$$+ \Big(x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} + z^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)$$
$$- \Big(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial z}\Big)^2 - \Big(x\frac{\partial}{\partial x}\Big)^2 - \Big(y\frac{\partial}{\partial y}\Big)^2 - \Big(z\frac{\partial}{\partial z}\Big)^2$$

soit de manière plus compacte

$$\mathbf{L}^2 = r^2\Delta - (r\frac{\partial}{\partial r})^2 - (r\frac{\partial}{\partial r})$$

ou encore

$$\mathbf{L}^2\psi = r^2\Delta\psi - \frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r})$$

Ainsi si $\psi(r,\theta,\varphi) = \psi(\theta,\varphi)$ on retrouve bien le laplacien de ψ sur la sphère unité. La forme choisie correspond à un objet bien connu dans la théorie des algèbres de Lie, c'est l'*élément de Casimir* de l'algèbre $\mathfrak{U}(\mathfrak{so}_3)$.

1.2 Équation de Schrödinger

Le problème des valeurs propres pour l'équation de Schrödinger de l'électron est le suivant : quelles sont les fonctions ψ de carré intégrable vérifiant

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{k\psi}{r} = E\psi$$

Il est commode de poser $a = \frac{\hbar^2}{2km}$ et $E = -\varepsilon k/a$, de sorte que l'équation se récrit

$$a\Delta\psi + \frac{\psi}{r} = \frac{\varepsilon}{a}\psi.$$

On choisit également a comme unité de longueur : ainsi, on se réduit à l'étude de l'équation

$$\Delta\psi + \frac{\psi}{r} = \varepsilon\psi.$$

Pour certaines raisons, on résout le problème en cherchant des solutions de la forme

$$\psi = \frac{1}{r}R(r)Y(\sigma)$$

où R est la partie radiale et Y la partie sphérique. Noter qu'on a alors

$$\int |\psi|^2 = 4\pi\int |R|^2 \int |Y|^2$$

(on a ainsi décomposé $L^2(\mathbf{R}^3)$ sous forme de produit tensoriel).

On remarque alors que

$$\mathbf{L}^2\psi = r^2\Delta\psi - \frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r})$$

soit

$$\frac{1}{r}R(r)(\mathbf{L}^2Y) = r^2\Delta\psi - (rR'')Y$$

où $\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ est l'opérateur introduit plus haut. L'équation devient :

$$\frac{1}{r}R''Y + \frac{1}{r^3}R(\mathbf{L}^2Y) + \frac{1}{r^2}RY = \varepsilon\frac{1}{r}RY.$$

On trouvera alors des fonctions propres par la méthode suivante : on cherche

$$\mathbf{L}^2(Y) = -l(l+1)Y$$
$$r^2R'' - l(l+1)R + rR = \varepsilon r^2 R$$

On verra que l est nécessairement un entier, et on peut montrer que

$$R = P_{n,l}(r)r^l\exp(-r\sqrt{\varepsilon}),$$

où $\varepsilon = 1/n^2$ et P est un *polynôme de Laguerre*.

Les fonctions propres de $\mathbf{L}^2$ sont également intéressantes pour l'étude de l'équation des ondes sphérique

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} = \mathbf{L}^2\varphi$$

ou de l'équation de la chaleur

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \mathbf{L}^2\varphi.$$

1.3 Valeurs propres du laplacien

Des éléménts de théorie spectrale permettent de montrer que le Laplacien admet des valeurs propres réelles. On a en fait la formule

$$\int_{\mathbb{S}^2} \bar{\psi}\Delta\psi = -\int_{\mathbb{S}^2} \|\nabla\psi\|^2$$

qui est un réel négatif. Cette formule montre que si on a une inégalité

$$A\|\psi\|^2 \leqslant \langle\psi, \Delta\psi\rangle \leqslant B\|\psi\|^2$$

sur un espace vectoriel de fonctions, cet espace est de dimension finie, à cause du théorème de plongement de Sobolev. En particulier, tous les espaces propres sont de dimension finie.

2 Propriétés algébriques

2.1 Opérateurs de création et d'annihilation

Les opérateurs L_k forment une *algèbre de Lie*:

$$\begin{aligned} L_xL_y - L_yL_x &= L_z \\ L_yL_z - L_zL_y &= L_x \\ L_zL_x - L_xL_z &= L_y \end{aligned}$$

Ces opérateurs sont antihermitiens, au sens où

$$\langle f, Lg\rangle = -\langle Lf, g\rangle$$

(en intégrant par parties). On définit des opérateurs spéciaux, dits *de création* et *d'annihilation*: ce sont

$$\begin{aligned} L_+ &= L_x - iL_y \\ L_- &= L_x + iL_y \end{aligned}$$

et on a $L_zL_+ - L_+L_z = iL_+$.

On utilisera aussi des opérateurs $J_\bullet = -iL_\bullet$, qui sont eux hermitiens. Le nom de ces opérateurs provient de la propriété suivante : si $J_z\psi = j_z\psi$, alors

$$\begin{aligned} J_z(L_+\psi) &= (j_z+1)(L_+\psi) \\ J_z(L_-\psi) &= (j_z-1)(L_-\psi) \end{aligned}$$

2.2 Structure des espaces propres

Soit E_λ un espace propre de Δ pour la valeur propre $-\lambda$. Cet espace est de dimension finie : l'opérateur J_z est donc diagonalisable sur E_λ.

Si $J_zv = mv$, on sait que J_+v est un vecteur propre de J_z pour la valeur $m+1$: comme les valeurs propres sont en nombre fini, la conclusion est que J_+ est une matrice nilpotente, c'est-à-dire que $(J_+)^N = 0$ lorsque N est un nombre assez grand.

On vérifie que J_- est l'adjoint de J_+: on sait alors que J_- est aussi nilpotent.

La dernière propriété algébrique importante est

$$[J_+, J_-] = -[L_+, L_-] = -i[L_x, L_y] + i[L_y, L_x] = 2J_z$$

Elle permet de remarquer la chose suivante : si v correspond à la plus grande valeur propre m_{max},

$$2J_zv = m_{\text{max}}v = (J_+J_- - J_-J_+)v = J_+J_-v$$

Alors la formule $-\Delta = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_-J_+ + J_+J_-)$ montre immédiatement que

$$\lambda = m_{\text{max}}^2 + m_{\text{max}}.$$

Mais si w est un vecteur propre pour une valeur propre $m_{\text{max}} - 1 < \mu < m_{\text{max}}$, on a alors $J_+w = 0$, et par le même raisonnement, $\lambda = \mu^2 + \mu$, ce qui est impossible !

En itérant ce raisonnement, on voit que les valeurs propres sont toutes de la forme $m_{\text{max}} - m$ où m est un entier, et comme

$$\lambda = m_{\text{min}}^2 - m_{\text{min}}$$

on déduit que $m_{\min} = -m_{\max}$ exactement, c'est-à-dire que $m_{\max}$ est en fait un entier (ou un demi-entier).

On conclut en disant que la rotation d'axe z et d'angle θ est exactement donnée par $\exp(i\theta J_z)$: en choisissant $\theta = 2\pi$, on voit que les valeurs propres doivent être des entiers. Cela ne signifie pas que les valeurs propres demi-entières doivent être exclues : elles jouent un rôle essentiel dans la théorie des *spineurs*.

On notera V_m l'espace vectoriel des fonctions propres. Il est muni d'une action de trois opérateurs L_x, L_y, L_z satisfaisant les identités de commutation signalées plus haut : on dit que V_m est une *représentation* de l'algèbre de Lie $\mathfrak{so}_3 = \langle L_x, L_y, L_z \rangle$.

2.3 Décomposition spectrale

Le théorème de Peter-Weyl permet de décomposer une fonction en parties élémentaires :

Théorème (Peter-Weyl)**.** *Si G est un groupe de Lie compact, les fonctions de carré intégrable se décomposent de la manière suivante :*

$$L^2(G) = \widehat{\bigoplus_V} \operatorname{End}(V)$$

où V parcourt les représentations irréductibles de V. On fait ainsi correspondre à une fonction f sur G un opérateur sur V

$$L_f = \int_G f L_g dg$$

o L_g est la matrice de l'action de g sur V.

Si G est le groupe des nombres complexes de module 1, cette décomposition est simplement la décomposition de Fourier. Ce théorème permet aussi de retrouver la décomposition en harmoniques sphériques : l'identité $\mathbb{S}^2 = SO_3/SO_2$ permet d'écrire

$$L^2(SO_3) = \widehat{\bigoplus} \operatorname{End}(V_m)$$

et

$$L^2(\mathbb{S}^2) = \widehat{\bigoplus} V_m$$

Sur n'importe quel groupe de Lie compact, on peut définir un Laplacien à l'aide de l'opérateur de Casimir. Les différents morceaux de la décomposition de Peter-Weyl sont alors des espaces propres pour l'action de ce laplacien. Voir [2] pour une étude algébrique plus approfondie.

2.4 Polynômes harmoniques

À travers le théorème de Borel-Weil-Bott, on peut aussi identifier les représentations d'un groupe à certains espaces de fonctions polynomiales.

Ici, l'espace V_m des fonctions propres $\Delta f = -m(m+1)f$ s'identifie à un sous-espace de P_m les fonctions données par un polynôme homogène de degré m. Ce sous-espace est l'orthogonal des polynômes multiples de $(x^2 + y^2 + z^2)$, qui constitue $P_{m-2} \subset P_m$.

On retrouve la dimension de V_m, $(m+1)(m+2)/2 - m(m-1)/2 = 2m + 1$.

Ces polynômes sont appelés *polynômes harmoniques*: en effet, si $\Delta P = 0$, on a $\mathbf{L}^2 P = -\frac{\partial}{\partial r}(r^2 \frac{\partial P}{\partial r}) = -m(m+1)P$.

Références

[1] Jürgen Jost, *Riemannian geometry and geometric analysis*, 5th ed., Universitext, Springer-Verlag, Berlin, 2008. MR2431897 (2009g :53036)

[2] Anthony W. Knapp, *Lie groups beyond an introduction*, 2nd ed., Progress in Mathematics, vol. 140, Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2002. MR1920389 (2003c :22001)