

THÉORIE SPECTRALE ET EQUATION DE SCHRÖDINGER

Nicolas Berliat — encadré par M.Dietrich Häfner



Table des matières

1	Introduction	1
2	Théorie spectrale des opérateurs	2
2.1	Rappel d'analyse fonctionnelle	2
2.2	Théorie des opérateurs non bornés	4
2.2.1	Premières propriétés	4
2.2.2	Spectre d'un opérateur	8
2.2.3	Opérateur de multiplication	10
3	Adjoint de l'opérateur de Schrödinger	12
3.1	Etude géométrique de $-\Delta$	12
3.1.1	Espace de Sobolev H^2	12
3.1.2	Spectre essentiel du Laplacien	15
3.2	Perturbation par une fonction réelle	16
3.2.1	Théorème de Kato-Rellich	16
3.2.2	Inégalité de Hardy et application à l'opérateur de Schrödinger	17
4	Etude du spectre essentiel perturbé	18
4.1	Classes d'opérateurs réguliers	18
4.1.1	Opérateur compact	19
4.1.2	Théorème Spectral	21
4.1.3	Espace de Hilbert-Schmidt	23
4.2	Théorème de Weyl	25
4.2.1	Preuve du théorème	25
4.2.2	Application à l'opérateur de Schrödinger	28
5	Espaces de Sobolev et opérateurs sur les variétés	29
5.1	Analyse spectrale sur le n -Tore	29
5.2	Variété Riemannienne	30
5.2.1	Métrique Riemannienne	30
5.2.2	Intégration sur une variété riemannienne compacte	31
5.3	Opérateur de Laplace-Beltrami	32
5.3.1	Fonctions propres de Laplace-Beltrami	33
5.3.2	Etude des valeurs propres de Laplace-Beltrami dans le cas $M = \mathbb{S}^2$	36
6	Equation de Schrödinger : Modèle de l'atome d'hydrogène	38
6.1	Etats stationnaires	39
6.1.1	Harmoniques sphériques	41
6.1.2	Equation radiale	42
6.2	Fonction d'onde de l'atome d'hydrogène	43
7	Bibliographie	45

1 Introduction

Dans ce mémoire on se propose d'expliquer le modèle de l'atome d'hydrogène du point de vue de la mécanique quantique. Cela revient à résoudre une équation aux dérivés partielles dont les solutions sont les fonctions d'onde de l'électron dans l'atome d'hydrogène. On cherchera notamment à prouver l'existence d'un point de vue mathématique, des nombres quantiques, qui permettent de décrire l'ensemble des fonctions d'ondes possibles.

Ces fonctions d'ondes sont entièrement déterminées par une équation, l'équation de Schrödinger, où $|\psi\rangle$ représente une superposition d'état de l'atome (notation physique) :

$$\text{un ét} \quad \partial_t |\psi\rangle = -\Delta |\psi\rangle + V |\psi\rangle$$

Où V est un potentiel associé au type de système étudié. $H := -\Delta + V$ est appelé opérateur de Schrödinger, ou Hamiltonien. On va devoir étudier cette équation, et notamment, les valeurs propres de ce dernier opérateur, H .

Le bon cadre pour cette étude, sont les espaces de Hilbert. En effet, une particule est représentée par un vecteur d'état $|\psi\rangle$ représentant l'ensemble des superpositions d'état de la particule dans l'espace. C'est formellement un élément d'un espace de Hilbert de dimension infini, et d'un point de vue pratique, une fonction, intégrable et normalisée, sur un certain espace M qui sera dans notre cas, la sphère. Cependant, beaucoup de chose peuvent être dites pour des espaces M assez généraux, et comme l'étude des EDP a souvent été un prétexte pour étudier des théories mathématiques très riches, (comme par exemple, l'équation de la chaleur et la théorie de Fourier), on ne se privera pas de faire une description très précise des outils dont on a besoin, la théorie des opérateurs généraux, théorie spectrale et géométrie différentielle.

On verra alors que les notions mathématiques abstraites de valeurs propres et de spectre décrivent exactement les notions d'énergies de l'atome d'hydrogène, donnant ainsi une justification mathématique à l'existence des niveaux d'énergies, et comme on en a déjà parlé, des nombres quantiques.

Toute ces notions mathématiques développées sont basées sur les notions d'analyse fonctionnelle.

2 Théorie spectrale des opérateurs

2.1 Rappel d'analyse fonctionnelle

Dans cette partie, on va rappeler les notions de base d'analyse fonctionnelle, utilisées pour décrire la théorie des opérateurs dans le cadre borné. Il est en effet important d'avoir des outils dans les cas borné, car on essayera souvent, lorsqu'on a un opérateur, de se ramener à un cas où les preuves sont analogues à celle dans le cas bornés.

La notion "d'opérateur borné", c'est à dire d'application linéaire d'un espace vectoriel normé, dont les valeurs sur la sphère unité sont bornées, est exactement la même que celle de continuité de l'opérateur. En fait, c'est même le tout premier théorème d'analyse fonctionnelle, un opérateur est borné (sur la sphère/la boule unité) si et seulement si il est continue sur tout l'espace. Lorsqu'on dira borné, on parlera alors également de continuité.

On commence avant tout dans le cadre de ce TER, par la théorie des espaces de Hilbert.

Définition 2.1.1. (Espace de Hilbert) : *Un espace de Hilbert \mathcal{H} est un \mathbb{C} -espace vectoriel muni d'un produit hermitien $x, y \mapsto \langle x, y \rangle$, tel \mathcal{H} soit complet et **séparable** pour la norme associée au produit scalaire. Dans notre cas, l'espace de Hilbert \mathcal{H} sera supposé de dimension infini, sauf mention explicite du contraire.*

Notez qu'on suppose que l'espace de Hilbert est séparable. On ne le note pas dans la définition, mais on utilisera aussi la version analogue pour un \mathbb{R} -Espace de Hilbert, où le produit hermitien devient un produit scalaire. L'intérêt de supposer l'espace séparable, (i.e qui possède une partie dense dénombrable) est de pouvoir assurer l'existence de base Hilbertienne.

Définition 2.1.2. (Base Hilbertienne) : *Une base Hilbertienne d'un espace de Hilbert \mathcal{H} est une famille de vecteur $(e_i)_{i \in I}$ orthonormée pour le produit scalaire associé à \mathcal{H} tel que l'espace vectoriel engendré par cette famille soit dense dans \mathcal{H} . Une base Hilbertienne sera directement appelé base orthonormée de \mathcal{H} .*

En dimension finie, c'est de cette notion de base orthonormée que vient la décomposition d'un vecteur selon ses projections sur chaque axe. En dimension infinie, on a besoin de la densité afin de définir de façon analogue cette décomposition.

Lemme 2.1.1. (Décomposition de Fourier) : Si $(e_i)_{i \in I}$ est une base Hilbertienne et $x \in \mathcal{H}$, on a la décomposition dite de Fourier suivante :

$$x = \sum_{i \in I} \langle x, e_i \rangle e_i$$

Les complexes $\langle x, e_i \rangle$ sont appelés coefficients de Fourier de x .

Ensuite, dans un espace de Hilbert, une des choses importantes est que la notion de projection correspond à la minimisation d'une distance. Projeter un vecteur c'est chercher la plus petite distance possible entre le vecteur et l'espace sur lequel on projette. C'est toujours possible dans un espace de Hilbert, c'est ce que se lemme montre :

Lemme 2.1.2. (Projection sur un convexe fermé) : Soit \mathcal{H} un espace de Hilbert, et $C \subset \mathcal{H}$ convexe et fermé. Il existe une unique application $P_C : \mathcal{H} \rightarrow C$ vérifiant si $x \in \mathcal{H}$:

$$\begin{aligned} \forall y \in C \quad \|x - P_C(x)\| &\leq \|x - y\| \\ \forall y \in C \quad \langle x - P_C(x), y - P_C(x) \rangle &\leq 0 \end{aligned}$$

Une conséquence de ce lemme, est le théorème suivant, permettant une description complète du dual d'un espace de Hilbert :

Théorème 2.1.1. (Théorème de représentation de Riesz) : Soit $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ une forme linéaire et continue de \mathcal{H} , alors il existe un unique $y_L \in \mathcal{H}$ tel que

$$\forall x \in \mathcal{H} \quad L(x) = \langle y_L, x \rangle$$

Il existe également une version un peu plus forte, où on ne suppose pas la symétrie, mais où on a besoin d'une notion de coercivité. C'est le théorème de Lax-Milgram, très utilisé pour résoudre des équations aux dérivés partielles (EDP) :

Théorème 2.1.2. (Théorème de Lax-Milgram) : On suppose \mathcal{H} réel. On considère sur \mathcal{H} , une forme bilinéaire, continue $B : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$ et une forme linéaire continue $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$. Si B est coercive, i.e

$$\exists \alpha > 0 \quad \forall x \in \mathcal{H} \quad |B(x, x)| \geq \alpha \|x\|^2$$

Alors, il existe un unique $y_L \in \mathcal{H}$ tel que :

$$\forall x \in \mathcal{H} \quad B(x, y_L) = L(x)$$

Une implication pratique est cette caractérisation des espaces denses, qui sera très utilisée :

Lemme 2.1.3. (Double orthogonal) : Si $F \subset \mathcal{H}$ est un sous espace vectoriel, alors $(F^\perp)^\perp = \overline{F}$. En particulier, si F est un sous-espace vectoriel dense de \mathcal{H} si et seulement si $F^\perp = \{0\}$.

Enfin, on termine par un lemme d'analyse de Fourier. On définit la transformée de Fourier sur l'espace $L^2(\mathbb{R}^d)$ (ou sur le n-tore) par densité depuis l'espace de Schwartz. La transformation de Fourier sera alors une isométrie de L^2 , et les propriétés de ce genre d'opérateur seront plus développées dans la partie sur les opérateurs unitaires.

Théorème 2.1.3. (Théorème de Plancherel) : Soit $d \in \mathbb{N}$ et $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, soit \mathcal{F} , l'opérateur de la transformée de Fourier, défini par densité sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. Alors :

$$\|\mathcal{F}(f)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

De plus, \mathcal{F} est une isométrie bijective de $L^2(\mathbb{R}^d)$.

2.2 Théorie des opérateurs non bornés

2.2.1 Premières propriétés

Commençons par la théorie des opérateurs généraux. Les opérateurs sont des fonctions linéaires, et lorsqu'on dit "non borné" on sous entend qu'on ne sait pas si l'opérateur est continu. Ainsi, on ne peut définir sa norme sur tout l'espace de Hilbert. On définit alors un domaine propre à l'opérateur, c'est un sous-espace vectoriel, avec la seule contrainte que tous les éléments de cet espace puisse être pris comme variables par l'opérateur.

Définition 2.2.1. (Opérateur non borné) : Un opérateur A sur \mathcal{H} est une fonction linéaire $A : L \rightarrow \mathcal{H}$ où L est un sous-espace vectoriel de \mathcal{H} . On note $L = \mathcal{D}(A)$ le **domaine de A** , et on dit que A est à domaine dense si L est dense dans \mathcal{H} .

Tous les opérateurs seront supposés à domaine dense, sauf mention explicite du contraire. Beaucoup d'opérateurs en physique sont des opérateurs non bornés, la dérivation des fonctions en est un exemple. C'est le cas aussi de $-\Delta$, l'un des opérateurs les plus courants en EDP, intervenant dans l'équation des ondes, de la chaleur, et dans celle qui nous intéressera, l'équation de Schrödinger. On peut se dire que c'est étonnant de le retrouver dans autant de théorie, mais ce n'est en fait que la conséquence du choix de la modélisation physique utilisant le phénomène d'onde, de propagation et de dispersion. La chaleur (onde de chaleur) et la densité de présence (onde de probabilité) sont effectivement représentées par des ondes.

Comme travailler avec des opérateurs non continus est compliqué dans le cadre de l'analyse, on va avoir besoin d'une notion plus faible de continuité. C'est la notion d'opérateur fermé, qui permet de remplacer autant que possible la caractérisation séquentielle de la continuité. Cette notion se base sur le graphe de l'opérateur, qui est un sous ensemble d'un produit d'espace de Hilbert.

Définition 2.2.2. (Espace produit) : Si \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 sont des espaces de vectoriels munis d'un produit hermitien (ou scalaire) $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_1}$ et $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_2}$ respectivement, alors on définit la forme bilinéaire suivante appelée **produit hermitien (scalaire) somme** :

$$\forall (x_1, y_1), (x_2, y_2) \in (\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2)^2 \quad \langle x, y \rangle_{\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2} = \langle x_1, x_2 \rangle_{\mathcal{H}_1} + \langle y_1, y_2 \rangle_{\mathcal{H}_2}$$

Lemme 2.2.1. (Produit de Hilbert) : Soit \mathcal{H} un espace de Hilbert muni du produit hermitien $\langle \cdot ; \cdot \rangle$, $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ est un espace de Hilbert pour le produit hermitien somme. On a le même résultat si c'est un produit scalaire.

En particulier, si $A \subset \mathcal{H}^2$, on a que $(x, y) \in A^\perp$ si et seulement si $\langle x ; a_1 \rangle = \langle -y ; a_2 \rangle$ pour tout $(a_1, a_2) \in A$.

La preuve de ce lemme est immédiate en appliquant simplement les définitions. On notera que la norme associée au produit scalaire sur \mathcal{H}^2 est $\|(f, g)\|^2 = \|f\|^2 + \|g\|^2$ pour tout $f, g \in \mathcal{H}$, qu'on appellera norme somme sur \mathcal{H}^2 .

Définition 2.2.3. (Opérateur fermé) : Un opérateur A de domaine \mathcal{D} dense dans \mathcal{H} est dit fermé si il vérifie que pour toutes suites $f_n \in \mathcal{D}$, $x_n \in \mathcal{H}$ telles que $Af_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{H}} f$ et $x_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{H}} x$, alors $f \in \mathcal{D}$ et $Af = x$.

l'Opérateur est dit fermable si il possède une extension fermée.

Lemme 2.2.2. (Graphe fermé) : Un opérateur A sur \mathcal{H} de domaine \mathcal{D} est fermé si et seulement si le graphe de A définit ainsi :

$$\mathcal{G}_A = \{(f, g) \in \mathcal{H}^2 \mid g \in \mathcal{H} \quad f \in \mathcal{D} \quad Af = g\}$$

est fermé dans \mathcal{H}^2 pour la norme somme.

L'équivalence se démontre en utilisant seulement la caractérisation séquentielle des fermés dans les espaces métriques. On dira qu'un opérateur est fermable si il admet une extension fermée, plus précisément, si A est un opérateur sur le domaine \mathcal{D}_A , alors une extension est un opérateur B de domaine \mathcal{D}_B tel que :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_A &\subset \mathcal{D}_B \\ \forall x \in \mathcal{D}_A \quad Ax &= Bx \end{aligned}$$

Ce que note alors $A \subset B$

Lemme 2.2.3. (Extension fermée) : Un opérateur A fermable admet une plus petite extension notée \overline{A} .

Preuve : Soit B une extension de A fermé, alors $\overline{\mathcal{G}_A} \subset \mathcal{G}_B$ car le graphe de B est fermé. On note p_1 la projection sur la première variable, c'est à dire si $(f, g) \in \mathcal{G}_A$, alors $p_1(f, g) = f$. Soit $f \in p_1 \overline{\mathcal{G}_A}$ on définit $\overline{A}f$ comme l'unique g vérifiant $(f, g) \in \overline{\mathcal{G}_A}$. On a bien unicité car si $(f, g_1), (f, g_2)$ sont dans $\overline{\mathcal{G}_A}$, par stabilité et inclusion avec le graphe de B : $(0, g_1 - g_2) \in \mathcal{G}_B$ d'où $g_1 = g_2$ car B linéaire. De la même façon, on montre que \overline{A} est linéaire, et est de plus fermé car son graphe est, par définition, $\overline{\mathcal{G}_A}$, qui est fermé. \square

Enfin, la notion suivante est extrêmement importante. L'adjoint est l'opérateur "symétrique" et les relations entre un opérateur et son adjoint permettent de démontrer beaucoup de résultats très riches. En dimension finie, on sait par exemple que les applications linéaires symétriques (autoadjointes) sont diagonalisables. On ne peut espérer aussi facilement des résultats aussi forts, mais on verra qu'il est tout de même possible de faire beaucoup de choses.

Définition 2.2.4. (Adjoint) : Soit A un opérateur sur \mathcal{H} de domaine \mathcal{D}_A dense dans \mathcal{H} . On considère l'ensemble $\mathcal{D}_{A^*} = \{g \in \mathcal{H} \mid \exists k \in \mathcal{H} \quad \forall f \in \mathcal{D}_A \quad \langle Af; g \rangle = \langle f; k \rangle\}$ Il existe un unique opérateur A^* sur \mathcal{H} , de domaine \mathcal{D}_{A^*} , fermé, vérifiant :

$$\langle Af; g \rangle = \langle f; A^*g \rangle$$

pour tout $f \in \mathcal{D}_A$ et $g \in \mathcal{D}_{A^*}$, appelé **adjoint de A** .

De plus si A est fermé alors A^* est de domaine dense.

Preuve : On considère $\mathcal{D} = \{g \in \mathcal{H} \mid \exists k \in \mathcal{H} \quad \forall f \in \mathcal{D}_A \quad \langle Af; g \rangle = \langle f; k \rangle\}$ qui est non vide car contient 0. Soit $g \in \mathcal{D}$ et k_1, k_2 tel que $\forall f \in \mathcal{D}_A \quad \langle Af; g \rangle = \langle f; k_1 \rangle = \langle f; k_2 \rangle$.

Alors $\langle f; k_1 - k_2 \rangle = 0 \quad \forall f \in \mathcal{D}_A$, le produit scalaire de \mathcal{H} étant continu par Cauchy-Schwarz, la densité de \mathcal{D}_A nous donne que c'est vrai pour tout $f \in \mathcal{H}$, donc $k_1 = k_2$. On définit alors grâce à l'unicité $A^*g = k$, le même calcul montre que A^* est unique et la bilinéarité du produit scalaire nous donne sa linéarité sur le domaine $\mathcal{D}_{A^*} := \mathcal{D}$.

Montrons que A^* est fermé.

$$\begin{aligned} & (g, k) \in \mathcal{G}_{A^*} \\ \iff & A^*g = k \quad g \in \mathcal{D}_{A^*} \\ \iff & \forall f \in \mathcal{D}_A \quad \langle Af; g \rangle = \langle f; k \rangle \\ \iff & (g, k) \perp \{(Af, -f) \in \mathcal{H}^2 \mid f \in \mathcal{D}_A\} := M(A) \end{aligned}$$

Alors $\mathcal{G}_{A^*} = M(A)^\perp$, or l'orthogonal de $M(A)$ est toujours fermé, A^* est donc fermé par le lemme du [Graphe fermé](#).

Montrons que \mathcal{D}_{A^*} est dense. Soit $h \in \mathcal{D}_{A^*}^\perp$ et $v, w \in \mathcal{G}_{A^*}$. $\langle h; v \rangle = 0 = \langle -0, w \rangle$, donc $(h, 0) \in \mathcal{G}_{A^*}^\perp = (M(A)^\perp)^\perp = \overline{M(A)}$ car $M(A)$ est un sous-espace vectoriel. D'après la caractérisation séquentielle de l'adhérence, il existe h_n et g_n deux suites telle que $(h_n, g_n) \in M$ qui convergent respectivement vers h et 0. Or par définition de $M(A)$, il existe une suite x_n de \mathcal{D}_A qui vérifie : $Ax_n = h_n$ et $g_n = -x_n$ ce qui nous donne $Ax_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{H}} h$ et $x_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{H}} 0$. Comme A est fermé cela implique que $A0 = h = 0$.

$$\text{Ainsi } \mathcal{D}_{A^*}^\perp = \{0\}, \text{ donc } \overline{\mathcal{D}_{A^*}} = (\mathcal{D}_{A^*}^\perp)^\perp = \mathcal{H}. \quad \square$$

Définition 2.2.5. (Symétrique, Auto-adjoint) : Un opérateur A sur \mathcal{H} est dit **symétrique** si pour tout $f, g \in \mathcal{D}_A$ $\langle Af; g \rangle = \langle f; Ag \rangle$, c'est à dire $A \subset A^*$. On dit qu'il est **auto-adjoint** si $A = A^*$, donc en particulier $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^*)$.

Contrairement aux opérateurs bornés, définis sur tout \mathcal{H} , il y a une différence entre symétrique et auto-adjoint, qui tient essentiellement en une inclusion de domaine. Il existe cependant beaucoup d'exemples d'opérateurs symétriques non auto-adjoints. Les opérateurs symétriques gardent cependant de bonnes propriétés.

Lemme 2.2.4. Lemme (Fermeture) : Soit H , un opérateur sur \mathcal{H} de domaine dense \mathcal{D}_H . H est fermable si et seulement si \mathcal{D}_{H^*} est dense dans \mathcal{H} . Dans ce cas, $(H^*)^* = \overline{H}$. En particulier, tout opérateur symétrique est fermable.

Preuve : On reprend la notation de la preuve précédente, $M(H)$. On va montrer que $\overline{\mathcal{G}_H} = \mathcal{G}_{H^{**}}$, on a déjà montré dans la [preuve précédente](#) que $\mathcal{G}_{H^*} = M(H)^\perp$. Procédons par double inclusion :

$$\overline{\mathcal{G}_H} \subset M(H^*)^\perp :$$

Soit $(x, y) \in \overline{\mathcal{G}_H}$, on a une suite (x_n, y_n) de \mathcal{G}_H qui converge vers (x, y) . Soit $(v_1, v_2) \in M(H^*)$. $v_1 = H^*v$, $v_2 = -v$, $v \in \mathcal{D}_{H^*}$ et $Hx_n = y_n$ pour tout $n \in \mathbf{N}$ (en particulier $x_n \in \mathcal{D}_H$)

$$\begin{aligned} & \langle x, v_1 \rangle + \langle y, v_2 \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x_n, v_1 \rangle + \langle y_n, v_2 \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x_n, H^*v \rangle + \langle y_n, -v \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle Hx_n, v \rangle + \langle -Hx_n, v \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle 0, v \rangle = 0 \end{aligned}$$

$$M(H^*)^\perp \subset \overline{\mathcal{G}_H} :$$

Soit $(x, y) \in M(H^*)^\perp$, \mathcal{D}_H étant dense, on choisit une suite x_n de \mathcal{D}_H convergente vers x .

$$\begin{aligned} \forall v \in \mathcal{D}_{H^*} \quad & \langle x, H^*v \rangle + \langle y, -v \rangle \\ & = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle Hx_n, v \rangle + \langle -y, v \rangle \\ & = \langle \lim_{n \rightarrow \infty} (Hx_n - y), v \rangle = 0 \quad \text{car } (x, y) \perp M(H^*) \end{aligned}$$

Or \mathcal{D}_{H^*} est dense, on a donc $\lim_{n \rightarrow \infty} (Hx_n - y) = 0$ donc (x_n, Hx_n) converge vers (x, y) , d'où $(x, y) \in \overline{\mathcal{G}_H}$

H^{**} est bien défini car H^* est de domaine dense ainsi $\mathcal{G}_{H^{**}} = M(H^*)^\perp = \overline{\mathcal{G}_H}$, donc H^{**} est une extension fermée de H et son graphe est $\overline{\mathcal{G}_H}$ d'où $\overline{H} = H^{**}$. Si H est symétrique, alors on a $\mathcal{D}_H \subset \mathcal{D}_{H^*}$ donc ce dernier est dense.

Pour l'autre sens, si \mathcal{D}_{H^*} n'est pas dense, supposons H fermable, le graphe de sa fermeture serait $\overline{\mathcal{G}_H}$, on prend $x \in \mathcal{D}_{H^*}^\perp$, avec $x \neq 0$ (car le domaine de H^* n'est pas dense). Soit $f \in \mathcal{D}_{H^*}$, alors $\langle 0, T^*f \rangle + \langle x, f \rangle = 0$. Donc $(0, x) \in M(H^*)^\perp = \overline{\mathcal{G}_H}$. Si on note \overline{H} la fermeture, on a donc $\overline{H}0 = x$ et $x \neq 0$, ce qui est impossible. \square

Remarque. Un opérateur H de domaine dense et fermé vérifie d'après les deux lemmes précédents, $H = H^{**}$.

Regardons maintenant le noyau et l'image d'un opérateur. Etant donné qu'ils sont définis sur un domaine, la définition utilisée est la suivante. Si A est un opérateur de domaine \mathcal{D}_A :

$$\begin{aligned} \text{Ker}(A) &= \{x \in \mathcal{D}_A \mid Ax = 0\} \\ \text{Im}(A) &= \{y \in \mathcal{H} \mid \exists x \in \mathcal{D}_A \ Ax = y\} \end{aligned}$$

On a alors les caractérisations suivantes :

Lemme 2.2.5. (Noyau et image adjoint) Soit A un opérateur de domaine \mathcal{D}_A dense, alors :

- (1) $\text{Ker}(A^*) = \text{Im}(A)^\perp$ et $\text{Ker}(A^*)^\perp = \overline{\text{Im}(A)}$
- (2) Si de plus A est fermé : $\text{Ker}(A) = \text{Im}(A^*)^\perp$ et $\text{Ker}(A)^\perp = \overline{\text{Im}(A^*)}$

Preuve : Les égalités en (1) découlent de la définition [Adjoint](#) et du fait que $(E^\perp)^\perp = \overline{E}$ pour tout sous espace vectoriel E dans un Hilbert. Pour (2), l'inclusion $\text{Ker}(A) \subset \text{Im}(A^*)^\perp$ et, par passage à l'orthogonal, $\overline{\text{Im}(A^*)} \subset \text{Ker}(A)^\perp$ sont toujours vraies. On va faire le sens réciproque. Soit $x \in \text{Im}(A^*)^\perp$ et $f \in \mathcal{D}_{A^*}$, alors $\langle A^*f, x \rangle = 0 = \langle f, 0 \rangle$. Donc $x \in \mathcal{D}_{A^{**}} = \mathcal{D}_A$ car A est fermé et de domaine dense, mais alors par le lemme [Fermeture](#), $Ax = A^{**}x = 0$, d'où $x \in \text{Ker}(A)$. On conclut pour la dernière égalité par passage à l'orthogonal. \square

Terminons alors avec un critère essentiel pour déterminer si un opérateur est autoadjoint. La propriété de symétrie est souvent très simple à vérifier, et d'un point de vue EDP, une condition sur l'image d'un opérateur revient à demander (dans le cas d'opérateur différentiel), si une certaine EDP possède une solution. Ce qui est le cadre de nos théorèmes de Riesz et Lax-Milgram, qu'on utilisera plus tard.

Théorème 2.2.1. (Critère auto-adjoint) Soit A un opérateur symétrique sur \mathcal{H} de domaine dense \mathcal{D}_A . On a équivalence entre :

- (1) A est auto-adjoint
- (2) $\text{Ker}(A^* \pm i \text{id}) = 0$ et A est fermé
- (3) $\text{Im}(A \pm i \text{id}) = \mathcal{H}$

Preuve :

(3) \implies (1) Le domaine \mathcal{D}_A étant dense, on peut définir son adjoint sur \mathcal{D}_{A^*} d'après la définition [Adjoint](#). Comme l'opérateur est symétrique, on a immédiatement que $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_{A^*}$ et qu'ils coïncident sur \mathcal{D}_A . Il suffit alors de vérifier que $\mathcal{D}_{A^*} \subset \mathcal{D}_A$. Soit $f \in \mathcal{D}_{A^*}$. l'Opérateur $A^* - i \text{id}$ est bien défini sur \mathcal{D}_{A^*} et à valeur dans \mathcal{H} , alors par hypothèse, il existe $v \in \mathcal{D}_A$ tel que $A^*f - if = Av - iv$. Or $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_{A^*}$ et $(A^* - i \text{id})(f - v) = A^*f - if - (A^*v - iv) = A^*f - if - (Av - iv) = 0$ (car A^* coïncide avec A sur son domaine). Donc $f - v \in \text{Ker}(A^* - i \text{id}) = \text{Im}(A + i)^{\perp}$ par le lemme [Noyau et image adjoint](#). Or $\text{Im}(A + i)^{\perp} = \mathcal{H}^{\perp} = \{0\}$. Donc $f = v \in \mathcal{D}_A$.

(2) \implies (3) D'après le lemme [Noyau et image adjoint](#), si A est fermé et $\text{Ker}(A^* \pm i \text{id}) = \{0\}$, alors on a $\text{Im}(A \pm i \text{id}) = \mathcal{H}$.

(1) \implies (2) A est auto-adjoint donc $A = A^*$ et comme \mathcal{D}_A est dense, A^* est fermé par la définition [Adjoint](#), donc A fermé. Soit $f \in \text{Ker}(A^* \pm i \text{id})$. Alors $A^*f = \pm if = Af$. On a alors :

$$i\langle f, f \rangle = \langle if, f \rangle = \langle \pm Af, f \rangle = \langle f, \pm A^*f \rangle = \langle f, if \rangle = \bar{i}\langle f, f \rangle = -i\langle f, f \rangle$$

Donc $i\langle f, f \rangle = 0$ d'où $f = 0$. □

Corollaire 2.2.1. (Second critère) : Si A est un opérateur symétrique de domaine dense, tel que $\text{Im}(A + i \text{id}) = \mathcal{H}$, alors il est autoadjoint.

Preuve : Il suffit de reprendre la preuve de (3) \implies (1) du théorème précédent en remplaçant $-i$ par 1 , on a en effet $\text{Im}(A + 1)^{\perp} = \text{Ker}(A^* + 1)$. □

2.2.2 Spectre d'un opérateur

Le spectre est la notion qui généralise les valeurs propres. En dimension finie, une valeur propre signifie que l'opérateur perturbé par la multiplication par cette valeur propre est un opérateur non injectif, et par théorème du rang non surjectif. En dimension infinie, ce n'est plus vrai, et on doit préciser si les valeurs telles que l'opérateur perturbé ne soit pas bijectif vient du coté non surjectif, ou non injectif. On regroupe en tout cas toutes les catégories dans un ensemble appelé spectre de l'opérateur.

Définition 2.2.6. (Spectre d'un opérateur) Soit A un opérateur de \mathcal{H} . Un complexe $\lambda \in \mathbb{C}$ est dans la résolvante de $\rho(A)$ de A si l'opérateur $(A - \lambda \text{Id})$ est inversible **et d'inverse borné**, sinon λ est appelé une valeur spectrale de A . On note $\sigma(A)$ le spectre de A , qui est l'ensemble des valeurs spectrales de A . Si $z \in \rho(A)$ on note $R(z) = (A - z)^{-1}$ l'inverse de $(A - z \text{Id})$.

En particulier l'existence d'une résolvante permet de "faire passer" les suites convergentes par cette dernière, et montre le caractère fermé de l'opérateur.

Lemme 2.2.6. (Critère de fermeture) Soit A un opérateur de domaine \mathcal{D}_A . Si $\rho(A) \neq \emptyset$, alors A est un opérateur fermé.

Preuve : Soit $z \in \rho(A)$, $R(z)$ est un opérateur borné par hypothèse. Soit x_n une suite de \mathcal{D}_A tel que $x_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} x \in \mathcal{H}$ et $Ax_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} y$. On pose $h_n = (z \text{id} - A)x_n$.

$$h_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} zx - y$$

donc $R(z)(zx - y) = \lim_{n \rightarrow \infty} (R(z)h_n) = x$ Car $R(z)$ est continue

D'où $x \in \mathcal{D}_A$ et $(z \text{id} - A)x = zx - y$, ce qui donne $Ax = y$ et A est fermé. \square

Définition 2.2.7. (Spectre discret et essentiel) Soit A un opérateur et $\lambda \in \mathbb{C}$, on note n_λ la dimension de $\text{Ker}(A - \lambda \text{id})$. Les ensembles :

$$\begin{aligned}\sigma_{disc}(A) &= \{\lambda \in \sigma(A) \mid n_\lambda \in \mathbb{N}^* \text{ et } \lambda \text{ est isolé}\} \\ \sigma_{ess}(A) &= \sigma(A) \setminus \sigma_{disc}(A)\end{aligned}$$

sont appelés respectivement spectre discret et spectre essentiel de A . On rappelle qu'un nombre complexe $z_0 \in \Omega \subset \mathbb{C}$ est dit **isolé** si il existe $r > 0$ tel que pour tout $B(z_0, r) \cap \Omega = \{z_0\}$.

Un lemme très important est celui des résolvantes, qui nous montre que ces dernières sont en fait des fonctions (valuées) analytiques, c'est à dire qu'on peut les écrire comme séries entières à valeurs dans l'espace des opérateurs. On a alors des propriétés algébriques pratiques sur ses résolvantes.

Lemme 2.2.7. (Equation des résolvantes) L'ensemble résolvante de A , $\rho(A)$ est un ouvert de \mathbb{C} , et la fonction $z \mapsto R(z)$ est analytique en z , et vérifie que pour tout $z, w \in \rho(A)$:

$$\begin{aligned}R(z) - R(w) &= (w - z)R(z)R(w) \\ R(z)R(w) &= R(w)R(z)\end{aligned}$$

Preuve : Soit $z_0 \in \rho(A)$, on définit la série $S(z) = R(z_0)(\text{id} + \sum_{n=1}^{\infty} (z_0 - z)^n R(z_0)^n)$, qui converge pour la norme d'opérateur si et seulement si $|z - z_0| < \|R(z_0)\|^{-1}$, on prend z vérifiant l'inégalité. S vérifie $S(z) = R(z_0) - zR(z_0)S(z)$ et $S(z) = R(z_0) - zS(z)R(z_0)$, ce qui montre que S a même noyau et image que $R(z_0)$ donc est continu. De plus, $(A - z \text{id})S(z) = S(z)(A - z \text{id}) = \text{id}$, ce qui montre que $\rho(A)$ est ouvert. $R(z) = S(z)$ a un développement en série entière en z donc est analytique. Pour démontrer la première équation, on écrit que pour tout $z, w \in \rho(A)$

$$\begin{aligned}R(z) - R(w) &= R(z)(A - w \text{id})R(w) - R(z)(A - z \text{id})R(w) \\ &= R(z)((A - w \text{id}) - (A - z \text{id}))R(w) \\ &= R(z)((w - z) \text{id})R(w) \\ &= (w - z) \text{id} R(z)R(w)\end{aligned}$$

On démontre la commutativité en intervertissant w et z dans cette équation. \square

Dans la suite, on démontre des propriétés du spectre pour un opérateur borné et autoadjoint. Ce sont des résultats faciles, mais extrêmement utiles pour la suite, notamment le spectre d'un opérateur autoadjoint, qui nous permettra de représenter les valeurs propres d'un certain opérateur comme des énergies quantifiées dans l'atome d'hydrogène.

Lemme 2.2.8. (Spectre compact) : Si A est un opérateur borné sur \mathcal{H} , alors son spectre $\sigma(A)$ est compact.

Preuve : Le lemme précédent nous donne déjà que $\sigma(A)$ est fermé dans \mathbb{C} , il ne reste plus qu'à voir qu'il est borné, et il sera automatiquement compact. A étant borné, $\|A\| < +\infty$. Si A est nul, le spectre est vide donc compact. Supposons A non nul, Soit $\lambda \in \mathbb{C}^*$ tel que $|\lambda| > \|A\|$. On a :

$$A - \lambda \text{id} = \lambda \left(\frac{1}{\lambda} A - \text{id} \right) \quad (\lambda \neq 0)$$

Or $\|\frac{1}{\lambda} A\| < 1$, donc comme A est continu, $A - \lambda \text{id}$ est inversible donc $\lambda \notin \sigma(A)$, d'où $\sigma(A) \subset \overline{B(0, \|A\|)}$. \square

Lemme 2.2.9. (Résolvante bijective) Soit A est un opérateur fermé de domaine \mathcal{D}_A . On suppose qu'il existe $\lambda \in \mathbb{C}$ et $C > 0$ tels que :

$$\|f\| \leq C\|Af - \lambda f\| \quad \forall f \in \mathcal{D}_A$$

Alors $\text{Ker}(A - \lambda \text{id}) = \{0\}$ et $\text{Im}(A - \lambda \text{id})$ est fermé. De plus si A est auto-adjoint, on a $\text{Im}(A - \bar{\lambda} \text{id})$ dense dans \mathcal{H} .

Preuve : Si $f \in \text{Ker}(A - \lambda)$, l'inégalité donne directement $f = 0$. Si A est autoadjoint, on a $(A - \lambda)^* = (A - \bar{\lambda})$, alors par la lemmes [Noyau et image adjoint](#), $\text{Im}(A - \bar{\lambda})$ est dense dans \mathcal{H} . Il ne reste plus qu'à montrer que $\text{Im}(A - \lambda)$ est fermé. Soit g_n une suite de $\text{Im}(A - \lambda)$ convergente vers g alors il existe $f_n \in \mathcal{D}_A$ tel que $g_n = Af_n - \lambda f_n$ d'après l'inégalité et linéarité de l'opérateur, f_n est une suite de Cauchy de \mathcal{H} qui est complet donc converge vers $f \in \mathcal{H}$. Mais comme A est fermé, $f \in \mathcal{D}_A$ et $Af - \lambda f = g$ d'où $g \in \text{Im}(A - \lambda)$, donc l'image est fermée. \square

Lemme 2.2.10. (Spectre auto-adjoint) Si A est un opérateur auto-adjoint, alors son spectre est non vide et inclus dans \mathbb{R} .

Preuve : On va montrer que $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \subset \rho(A)$. Soit $a + ib = z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. On a les égalités :

$$\begin{aligned} \forall f \in \mathcal{D}_A \quad \|(A - (a + ib))f\|^2 &= \|(A - a)f\|^2 + b^2\|f\|^2 \\ \forall f \in \mathcal{D}_A \quad \|(A - \overline{(a + ib)})f\|^2 &= \|(A - a)f\|^2 + b^2\|f\|^2 \end{aligned}$$

Ces égalités se démontrent en passant au produit scalaire et en développant. Comme $b \neq 0$, par le lemme [Résolvante bijective](#), $(A - \lambda)$ est injective et son image est dense et fermée donc égale à \mathcal{H} . $(A - \lambda)$ est donc un opérateur bijectif borné, donc comme \mathcal{H} est complet, son inverse est borné, d'où $z \in \rho(A)$.

Supposons que $\rho(A) = \mathbb{C}$, Soit $f, g \in \mathcal{H}$ la fonction $z \mapsto \langle R(z)f, g \rangle$ est entière et tend vers 0 quand $|z|$ tend vers $+\infty$ car $\|R(z)\| \leq |\text{Im}(z)|^{-1}$ d'après les égalités au dessus. Donc par le théorème de Liouville, cette fonction est identiquement nulle, c'est vrai pour tout $f, g \in \mathcal{H}$ donc $R(z)$ est identiquement nulle. Contradiction. \square

2.2.3 Opérateur de multiplication

Le but de cette sous partie est d'étudier les opérateurs de multiplication. On va remarquer qu'il est facile de déterminer le spectre d'un opérateur de multiplication, l'opérateur qu'on doit étudier est le Laplacien, et peut être vu (par passage en Fourier) comme un opérateur de multiplication. Les propriétés de ces opérateurs sont donc importantes à connaître.

Définition 2.2.8. (Opérateur de multiplication) : Soit $n \in \mathbb{N}$. On se place sur $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$. Un opérateur A est appelé opérateur de multiplication si il existe une fonction a , mesurable, de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} tel que $Af : x \mapsto a(x)f(x)$. Son domaine est défini par $\mathcal{D}_A = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \int_{\mathbb{R}^n} (1 + a(x)^2)|f(x)|^2 dx < +\infty\}$

Lemme 2.2.11. (Multiplication adjoint) : En reprenant les notations de la [définition précédente](#), un opérateur de multiplication est auto-adjoint sur le domaine \mathcal{D}

Preuve : A est clairement symétrique sur \mathcal{D} . Soit $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, on pose $(R_z f)(x) := \frac{1}{z - a(x)} f(x)$ pour $f \in \mathcal{D}$ et $x \in \mathbb{R}^d$. Alors $R_z(z - A)f = f \quad \forall f \in \mathcal{D}$. De même si $f \in \mathcal{H}$ alors $R_z f \in \mathcal{D}$ et $(z - A)R_z f = f$. De plus, R_z est borné donc $z \in \rho(A)$. Par le lemme [Critère de fermeture](#), A est fermé. Enfin, $\text{Ker}(A^* \pm i \text{id}) = \{0\}$, donc par le [Critère autoadjoint](#), A est autoadjoint sur \mathcal{D} . \square

Lemme 2.2.12. (Spectre de multiplication) : Soit A un opérateur de multiplication sur $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, de même domaine \mathcal{D} que dans le lemme précédent, associé la fonction $a : x \mapsto a(x) \in \mathbb{R}$. Le spectre de A est l'ensemble des $y \in \mathbb{R}$ tel que $\forall \epsilon > 0 \quad \lambda(\{x \in \mathbb{R}^d \mid |a(x) - y| < \epsilon\}) > 0$, où λ est la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d .

Preuve : Par **Multiplication adjoint**, A est auto-adjoint, il suffit de chercher les valeurs spectrales dans \mathbb{R} . Soit $y \in \mathbb{R}$ tel que $\Gamma_y(\epsilon) = \{x \mid |a(x) - y| < \epsilon\}$ soit de mesure nulle pour un certain $\epsilon > 0$. Pour tout $x \notin \Gamma_y(\epsilon)$, on pose $r_y(x) = \frac{1}{y-a(x)}$, la fonction r_y est par hypothèse bornée presque partout, et son opérateur de multiplication associé R_y sur \mathcal{H} est donc borné. De plus on a $Im(R_y) = \mathcal{D}$ et $(y \text{ id} - A)R_y = \text{id} = R_y(y \text{ id} - A)$, d'où $y \in \rho(A) = \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$. Réciproquement, si y est tel que $\forall \epsilon > 0 \quad \lambda(\Gamma_y(\epsilon)) > 0$, on pose pour $m \in \mathbb{N} : S_m = \Gamma_y(\frac{1}{2^m})$, qui est donc de mesure non nulle. On peut supposer sans perte de généralité que cette mesure est finie, et on note f_m la fonction de $L^2(\mathbb{R}^d)$ qui vaut 1 si $x \in S_m$ et 0 sinon. $f_m \neq 0$ et :

$$\|(y - A)f_m\| \leq \frac{1}{2^m} \|f_m\|$$

Alors si $(y - A)$ a un inverse borné, alors $\forall m \in \mathbb{N} \quad \|(y - A)^{-1}\| \geq 2^m$, impossible, donc $(y - A)$ n'a pas d'inverse borné, c'est à dire $y \in \sigma(A)$. \square

Définition 2.2.9. (Opérateur unitaire) : Un opérateur borné U de \mathcal{H} est dit unitaire si il vérifie : $UU^* = U^*U = \text{id}$.

Lemme 2.2.13. (Caractérisation des opérateurs unitaires) : Soit U un opérateur borné de \mathcal{H} . Les propriétés suivantes sont équivalentes :

$$U \text{ est unitaire} \tag{4}$$

$$U \text{ est surjective et : } \forall x, y \in \mathcal{H} \quad \langle Ux, Uy \rangle = \langle x, y \rangle \tag{5}$$

$$U \text{ est inversible d'inverse borné et : } \forall x, y \in \mathcal{H} \quad \langle Ux, Uy \rangle = \langle x, y \rangle \tag{6}$$

En particulier, un opérateur unitaire préserve la norme donc est injectif, donc inversible.

Preuve :

(4) \implies (5) La surjectivité est immédiate car U est inversible. Si $x, y \in \mathcal{H}$, alors $\langle Ux, Uy \rangle = \langle x, U^*Uy \rangle = \langle x, y \rangle$.

(5) \implies (6) Comme U préserve le produit scalaire, on a $\|Ux\| = \|x\|$ pour tout $x \in \mathcal{H}$, donc U est injectif, donc inversible car surjectif par hypothèse. Si $y \in \mathcal{H}$, $\forall x \in \mathcal{H} \quad \langle Ux, Uy \rangle = \langle x, U^*Uy \rangle = \langle x, y \rangle \implies \forall x \in \mathcal{H} \quad \langle x, U^*Uy - y \rangle = 0$, donc $U^*U = \text{id}$. U étant inversible, l'autre sens est direct par unicité de l'inverse d'où $U^* = U^{-1}$. Mais alors, si $x \in \mathcal{H}$, $\langle U^*x, U^*x \rangle = \langle x, UU^*x \rangle = \langle x, x \rangle = \|x\|^2$, donc U^* est borné.

(6) \implies (4) On vérifie de la même façon que précédemment que $U^*U = UU^* = \text{id}$. \square

Remarque. La transformée de Fourier (définie en prolongeant par densité sur $L^2(\mathbb{R}^d)$) est, d'après le théorème de Plancherel, une isométrie surjective. Elle vérifie (5), c'est donc un opérateur unitaire sur $L^2(\mathbb{R}^d)$.

3 Adjoint de l'opérateur de Schrödinger

3.1 Etude géométrique de $-\Delta$

Dans cette partie, on s'intéresse à l'opérateur Laplacien $-\Delta$ sur $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, opérateur différentiel défini pour $u \in C^2(\Omega)$ par :

$$-\Delta u = - \sum_{i=1}^d \partial_i^2 u$$

Où $\partial_i^2 u$ est la dérivée partielle seconde de u selon la i -ième variable. On l'écrit aussi $-\Delta = -\operatorname{div} \nabla$.

Il est possible de définir le Laplacien dans des cadres plus abstraits, où les dérivées partielles sont prises au sens faible, dans le sens que l'on va définir plus bas. On va s'intéresser aux différentes propriétés qu'on a introduites dans la partie précédente, appliquées au Laplacien.

3.1.1 Espace de Sobolev H^2

Définition 3.1.1. (Dérivées faibles) : Soit $n \geq 1$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un ouvert. On dit qu'une fonction $f \in L^1_{loc}(\Omega)$ admet une dérivée partielle au sens faible en $i \in \llbracket 1; n \rrbracket$, si :

$$\begin{aligned} \exists v_i \in L^1_{loc}(\Omega) \quad \forall \phi \in C_c^\infty(\Omega) : \\ \int_{\Omega} f \partial_i \phi \, dx = - \int_{\Omega} v_i \phi \, dx \end{aligned}$$

v_i est alors appelé dérivée faible de f en i .

Comme pour la dérivée, il y a une unicité de la dérivée faible. Cependant, étant des fonctions dans des espaces L^p , cette unicité n'est vraie que presque partout et découle du fait que si $f \in L^1_{loc}(\Omega)$ et $\forall \phi \in C_c^\infty(\Omega) \int_{\Omega} f \phi \, dx = 0$ alors $f = 0$ presque partout.

Lemme 3.1.1. (Unicité de la dérivée faible) : Soit $f \in L^1_{loc}$. Si f admet pour dérivées partielles en i , les fonctions $u, v \in L^1_{loc}$, alors $u = v$ presque partout.

Définition 3.1.2. (Espaces de Sobolev) : Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un ouvert. Soit $(m, p) \in \mathbb{N} \times \mathbb{R}$, les sous-espaces vectoriels

$$W^{m,p}(\Omega) = \{u \in L^p(\Omega) \mid \forall \alpha \in \mathbb{N}^n, \text{ tels que } |\alpha| \leq m, \partial_\alpha^{|\alpha|} u \text{ existent et sont dans } L^p(\Omega)\}$$

sont appelés Espaces de Sobolev. Ils sont complets pour la norme $\|u\|_{m,p} = \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial_\alpha^{|\alpha|} u\|_{L^p}^p \right)^{1/p}$, et on note

$H^n(\Omega) = W^{n,2}(\Omega)$ qui est un espace de Hilbert.

Un premier lemme important qu'on utilisera plus tard, est noté "Friedricks global" car il correspond au cas $\Omega = \mathbb{R}^d$ dans le théorème d'approximation de Friedrich. Bien que ce soit un théorème important pour la théorie des espaces de Sobolev, nous n'aurons besoin que de ce cas particulier.

Les outils pour le démontrer sont classiques en analyse. On va les rappeler sans faire les preuves complètes des différentes propriétés.

Définition 3.1.3. (Suite régularisante) : Une suite de fonction $(\varphi)_{k \in \mathbb{N}}$ de $C_c^\infty(\Omega)$ est dit régularisante si pour tout $k \in \mathbb{N}$, il existe $\epsilon_k > 0$ tel que :

- (1) $\varphi_k \geq 0$
- (2) $\int_{\mathbb{R}^n} \varphi_k(x) dx = 1$
- (3) $\text{Supp}(\varphi_k) \subset B(0, \epsilon_k)$ et $\epsilon_k \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0$

L'existence d'une suite régularisante ne sera pas démontrée, mais on va indiquer la marche à suivre pour en construire. Si $\varphi \in C_c^\infty(\Omega)$, alors on peut vérifier que la suite $(\varphi_k)_k$ avec pour $k \in \mathbb{N}$, $\varphi_k = k^n \varphi(kx)$ est une suite régularisante. C'est la façon classique de construire ce genre de fonctions. Elles sont très utiles, c'est notamment grâce à cela qu'on peut montrer que $C_c^\infty(\Omega)$ est dense dans L^p , en le combinant avec un autre outil, le produit de convolution, qui agit comme une régularisation de fonctions, et défini par :

$$\forall f, g \in L^2(\mathbb{R}^n) \quad f * g(x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x-y)g(y) dy$$

Remarque. Une des propriété importante de la convolution, et qu'elle préserve la différentiabilité de la fonction la plus régulière, et c'est également vrai si la dérivée est au sens faible. Ainsi, si f, g sont deux fonctions admettant des dérivées (faibles) en i , alors

$$\partial_i(f * g) = (\partial_i f) * g = f * (\partial_i g)$$

Lemme 3.1.2. (Approximation de l'unité) : Pour toute fonction $f \in L^p(\mathbb{R}^n)$ (si $1 \leq p < +\infty$, si $(\varphi_k)_k$ est une suite régularisante, alors $\varphi_k * f \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{L^p} f$

Preuve :

$$\begin{aligned} (f * \varphi_k)(x) - f(x) &= \int_{\mathbb{R}^n} (f(x-y) - f(x))\varphi_k(y) dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} (\tau_{-\frac{y}{k}} f(x) - f(x))\varphi(y) dy \quad \text{Où } \tau_x \text{ est une translation de } x \end{aligned}$$

Donc, en utilisant l'inégalité de Hölder, où $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

$$\|f * \varphi_k - f\|_{L^p}^p \leq \left(\int_{\mathbb{R}^n} \|\tau_{-\frac{y}{k}} f - f\|_{L^p}^p |\varphi(y)| dy \right) \left(\int_{\mathbb{R}^n} |\varphi(y)| dy \right)^{\frac{p}{q}}$$

Et on passe à la limite dans l'intégrale avec le théorème de la convergence dominée. □

Lemme 3.1.3. (Densité global/Friedrick global) : Soit $u \in W^{1,p}(\mathbb{R}^d)$, il existe une suite de fonctions $u_k \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ telles que $\|u - u_k\|_{W^{1,p}(\mathbb{R}^d)} \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0$.

Preuve : On peut choisir une suite régularisante φ_k sur \mathbb{R}^d , ainsi qu'une fonction de troncature $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ telle que $0 \geq \chi \geq 1$ et $\chi = 1$ sur $B(0, 1)$ et $\chi = 0$ hors de $B(0, 2)$, on pose $\chi_k = \chi(\frac{\cdot}{k})$ et $u_k = (\varphi_k * u)\chi_k \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Pour montrer la convergence en norme $W^{1,p}$, il suffit alors de vérifier :

- (1) $\|u - u_k\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0$
- (2) $\|\partial_i u - \partial_i u_k\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0$

Pour le (1) : (lorsque la norme n'est pas précisée, c'est une norme sur L^p)

$$\begin{aligned} \|u - u_k\| &= \|u - (\varphi_k * u)\chi_k\| \leq \|\chi_k(\varphi_k * u - u)\| + \|(\chi_k - 1)u\| \\ &\leq \|\chi_k\|_{L^\infty} \underbrace{\|\varphi_k u - u\|_{L^p}}_{\xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0} + \|(\chi_k - 1)u\| \quad (\text{Approximation de l'unité}) \end{aligned}$$

De plus $|\chi_k - 1||u| \leq |u| \in L^p(\mathbb{R}^d)$ et $\chi_k \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{p \cdot p} 1$. Donc par le théorème de la convergence dominée, on a (1).

Pour le (2) :

$$\begin{aligned} \partial_i u_k &= \underbrace{\partial_i(\varphi_k * u_k)\chi_k}_{= (\varphi_k * \partial_i u_k)\chi_k \text{ d'après cette remarque}} \\ &+ (\partial_i \chi_k)(\varphi_k * u) \end{aligned}$$

Or comme $\partial_i u \in L^p$ par hypothèse,

$$(\varphi_k * \partial_i u)\chi_k \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{L^p} \partial_i u$$

De plus :

$$\partial_i \chi_k = \frac{1}{k}(\partial_i \chi)\left(\frac{\cdot}{k}\right)$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} \|\partial_i u - \partial_i u_k\| &= \|\partial_i u - (\varphi_k * \partial_i u_k)\chi_k - (\partial_i \chi_k)(\varphi_k * u)\| \\ &\leq \|(\partial_i \chi_k)(\varphi_k * u)\| + \|\partial_i u - (\varphi_k * \partial_i u_k)\chi_k\| \\ &\leq \underbrace{\frac{1}{k}}_{\xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0} \|\partial_i \chi\left(\frac{\cdot}{k}\right)\|_{L^\infty} \|\varphi_k * u\| + \|\partial_i u - (\varphi_k * \partial_i u_k)\chi_k\| \end{aligned}$$

Or $\|\partial_i \chi\left(\frac{\cdot}{k}\right)\|_{L^\infty} = \|\partial_i \chi\|_{L^\infty} < +\infty$, $\|\varphi_k * u\| \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} \|u\| < +\infty$ et $\|\partial_i u - (\varphi_k * \partial_i u_k)\chi_k\|$ tend vers 0 par le même argument que pour (1), car $\partial_i u \in L^p$. Ce qui montre le point (2). \square

Lorsqu'on travaille dans \mathbb{R}^d , on a l'existence d'une transformée de Fourier sur tout l'espace, et cela nous permet de caractériser les espaces de Sobolev dans L^2 par une définition plus pratique, qui met en avant que les fonctions dans H^2 sont capables "d'encaisser" des multiplications par $|\xi|$ (qui correspondent en Fourier à une dérivation, d'où l'analogie).

Lemme 3.1.4. (Caractérisation de $H^2(\mathbb{R}^d)$) : Si $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$, on note sa transformée de Fourier par $\hat{u} \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Alors :

$$H^2(\mathbb{R}^d) = \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}^d) \mid \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |\xi|^2)^2 |\hat{u}(\xi)|^2 d\xi < +\infty \right\}$$

Preuve : Il suffit de voir que la condition " f admet des dérivées secondes faibles de carré intégrable" est équivalente à $\int_{\mathbb{R}^d} (1 + |\xi|^2)^2 |\hat{u}(\xi)|^2 d\xi < +\infty$.

Supposons donc la seconde condition, \mathcal{F} est l'opérateur de la transformée de Fourier sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, on pose $\partial_i \partial_j u := \mathcal{F}^{-1}(\xi_i \xi_j \hat{u})$, vérifions que ces fonctions sont dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ et sont des dérivées faibles secondes de u , sans perte de généralité on peut supposer $\xi_i \geq \xi_j$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |\xi_i \xi_j \hat{u}(\xi)|^2 d\xi &\leq \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{1}{2}(1 + (\xi_j \xi_i)^2)\hat{u}(\xi)\right)^2 d\xi \\ &\leq \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^d} (1 + \xi_i^2)^2 \hat{u}^2(\xi) d\xi \\ &\leq \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |\xi|^2)^2 |\hat{u}(\xi)|^2 d\xi < +\infty \end{aligned}$$

On a donc $\mathcal{F}(\xi_i \xi_j \hat{u}) \in L^2(\mathbb{R}^d)$ donc par [Théorème de Plancherel](#), $\partial_i \partial_j u \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Montrons que $\partial_i \partial_j u$ est une dérivée partielle seconde de u , soit $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} (\partial_i \partial_j u) \phi \, d\xi &= \int_{\mathbb{R}^d} \xi_i \xi_j \hat{u} \hat{\phi} \, d\xi \quad (\text{Plancherel}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \hat{u} \underbrace{\xi_i \xi_j \hat{\phi}}_{=\mathcal{F}(\partial_i \partial_j \phi)} \, d\xi \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} u (\partial_i \partial_j \phi) \, d\xi \quad (\text{Encore Plancherel}) \end{aligned}$$

Ce qui montre que $u \in H^2(\mathbb{R}^d)$. Supposons ensuite $u \in H^2(\mathbb{R}^d)$, avec le même calcul, on peut remarquer que $\partial_i \partial_j u = \mathcal{F}^{-1}(x_i x_j \hat{u})$, alors :

$$\begin{aligned} \|(1 + |\xi|^2) \hat{u}\|_{L^2}^2 &\leq \|\hat{u}\|_{L^2} + \||\xi|^2 \hat{u}\|_{L^2} \\ &= \|u\|_{L^2} + \|\mathcal{F}^{-1}(|\xi|^2 \hat{u})\|_{L^2} \quad (\text{Toujours et encore Plancherel}) \\ &= \|u\|_{L^2} + \|\partial_i \partial_j u\|_{L^2} < +\infty \quad (\text{Car } u \in H^2(\mathbb{R}^d)) \end{aligned}$$

Ce qui montre l'autre inclusion. □

Fort de toutes ces considérations, et du critère de la partie précédente, on est paré à démontrer proprement que $-\Delta$ est un opérateur autoadjoint, ce qui marque le début de l'aventure.

Théorème 3.1.1. ($-\Delta$ autoadjoint) : *On considère l'opérateur $-\Delta$ sur le domaine $\mathcal{D} = H^2(\mathbb{R}^d)$ et $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, alors $-\Delta$ est autoadjoint sur \mathcal{D} .*

Preuve : Soit $f, g \in \mathcal{D} = H^2(\mathbb{R}^d)$, f et g admettent des dérivées secondes faibles $\partial_i^n f$ et $\partial_i^n g$, $0 \leq n \leq 2$, qui sont dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, dans le cas $\Omega = \mathbb{R}^d$, $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ est dense dans $H^2(\mathbb{R}^d)$, on peut donc raisonner directement, quitte à étendre le raisonnement par densité, avec $g \in H^2(\mathbb{R}^d)$. Alors $(-\Delta f)g \in L^1(\mathbb{R}^d)$ et :

$$\begin{aligned} \langle -\Delta f, g \rangle &= \int_{\mathbb{R}^d} (-\Delta f(x))g(x) \, dx \\ &= - \sum_{i=1}^d \int_{\mathbb{R}^d} (\partial_i^2 f(x))g(x) \, dx \\ &= - \sum_{i=1}^d (-1)^2 \int_{\mathbb{R}^d} f(x)(\partial_i^2 g(x)) \, dx \quad (\text{Définition Dérivées faibles}) \\ &= \langle f, -\Delta g \rangle \end{aligned}$$

Donc $-\Delta$ est symétrique sur $\mathcal{D} = H^2(\mathbb{R}^d)$, qui est dense dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Il suffit par le lemme [Critère Autoadjoint](#) de vérifier que $\text{Im}(-\Delta \pm i \text{id}) = \mathcal{H}$. Soit $f \in \mathcal{H}$, on cherche une solution à $-\Delta u \pm i u = f$. On note \mathcal{F} l'opérateur de la transformée de Fourier sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et on pose $u := \mathcal{F}^{-1}(\frac{1}{|\xi|^2 \pm i} \hat{f})$, si on vérifie que cette fonction est dans $H^2(\mathbb{R}^d)$, alors il est immédiat qu'elle vérifie l'équation désirée et donc $-\Delta \pm i \text{id}$ est surjectif. On pose $h_\pm : \xi \mapsto (\frac{1 \pm |\xi|^2}{i \pm |\xi|^2})^2$, on a $h_\pm \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$:

$$\int_{\mathbb{R}^d} (1 + |\xi|^2)^2 \left(\frac{1}{i \pm |\xi|^2} \hat{f}(\xi) \right)^2 \, d\xi = \int_{\mathbb{R}^d} h_\pm(\xi) \hat{f}(\xi)^2 \, d\xi \leq \|h_\pm\|_{L^\infty} \|\hat{f}\|_{L^2}^2 = \|h_\pm\|_{L^\infty} \|f\|_{L^2}^2 < +\infty$$

La dernière égalité est vraie par le [théorème de Plancherel](#). Par le lemme [Caractérisation de \$H^2\(\mathbb{R}^d\)\$](#) , $u \in H^2(\mathbb{R}^d)$, donc $-\Delta$ est auto-adjoint sur \mathcal{D} . □

3.1.2 Spectre essentiel du Laplacien

Dans cette partie, on démontre que le spectre essentiel du Laplacien est \mathbb{R}_+ . On débute d'abord par un lemme général sur le spectre d'un opérateur, et de son conjugué par un opérateur unitaire.

Lemme 3.1.5. (Spectre conjugué) : Soit A un opérateur de \mathcal{H} , et U un opérateur unitaire sur le même espace. Alors $\sigma(U^*AU) = \sigma(UAU^*) = \sigma(A)$, et $\sigma_{ess}(U^*AU) = \sigma_{ess}(UAU^*) = \sigma_{ess}(A)$

Preuve : Soit $z \in \mathbb{C}$. On a $U^*U = UU^* = \text{id}$, remarquons que :

$$U^*AU - z \text{id} = U^*(A - z \text{id})U$$

Par la [Caractérisation des opérateurs unitaires](#), U est inversible et d'inverse borné, ce qui nous donne immédiatement que $U^*AU - z \text{id}$ est inversible et d'inverse borné si et seulement si $(A - z \text{id})$ est inversible et d'inverse borné, c'est à dire $\sigma(U^*AU) = \sigma(A)$, qui est aussi égal à $\sigma(UAU^*)$, quitte à inverser U et U^* . Si $z \in \sigma_{disc}(A)$, pour tout z' tel que si $|z - z'| < R$ et $z \neq z'$, pour un certain $R > 0$, alors $(A - z')$ inversible et c'est également le cas de $U^*AU - z'$ par le même argument. Donc le spectre discret est conservé, donc le spectre essentiel également. \square

Lemme 3.1.6. (Spectre essentiel du Laplacien) l'Opérateur $-\Delta$ de domaine $H^2(\mathbb{R}^d)$ a pour spectre essentiel $\sigma_{ess}(-\Delta) = \mathbb{R}_+$.

Preuve : On pose \mathcal{F} l'opérateur correspondant à la transformation de Fourier sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. \mathcal{F} est unitaire d'après la remarque précédente, et $A := \mathcal{F}^*(-\Delta)\mathcal{F} : f \mapsto |x|^2 f$ est un opérateur de multiplication. Soit $y \in \mathbb{R}$ Etudions alors l'ensemble :

$$\Gamma_y(\epsilon) := \{x \in \mathbb{R}^d \mid ||x|^2 - y| < \epsilon\} \quad \epsilon > 0$$

Supposons d'abord $y > 0$.

Soit $0 < \epsilon \leq y$ on pose :

$$\begin{aligned} C_{y,\epsilon} &= \{x \mid \sqrt{y-\epsilon} < |x| < \sqrt{y+\epsilon}\} = B(0, \sqrt{y+\epsilon}) \setminus \overline{B(0, \sqrt{y-\epsilon})} \\ \lambda(C_{y,\epsilon}) &= \sqrt{y+\epsilon} - \sqrt{y-\epsilon} > 0 \\ \text{et } C_{y,\epsilon} &\subset \Gamma_y(\epsilon) \end{aligned}$$

Soit $\epsilon > y$, on a :

$$\begin{aligned} y - \epsilon < 0 &\leq |x|^2 < y + \epsilon \\ \text{d'où } ||x|^2 - y| &< \epsilon \\ \text{donc } B(0, \sqrt{y+\epsilon}) &\subset \Gamma_y(\epsilon) \end{aligned}$$

De plus, si $y = 0$, le cas $\epsilon > y$ fonctionne pour tout $\epsilon > 0$.

Supposons $y < 0$ alors $-y > 0$, on prend $\epsilon = -\frac{y}{2}$ soit $x \in \Gamma_y(\epsilon)$, alors $\epsilon > ||x|^2 - y| = |x|^2 - y \geq 2\epsilon > \epsilon$, contradiction, donc $\Gamma_y(\epsilon) = \emptyset$ qui est donc de mesure de Lebesgue nulle. Par le lemme [Spectre Multiplication](#), $\sigma(A) = \mathbb{R}_+$. Or, \mathbb{R}_+ ne contient aucun point isolé donc $\sigma_{disc}(A) = \emptyset$, d'où $\sigma_{ess}(A) = \sigma(A) = \mathbb{R}_+$. Or \mathcal{F} est unitaire par la [remarque précédente](#), d'après le lemme [Spectre conjugué](#), $\sigma_{ess}(-\Delta) = \sigma_{ess}(A) = \mathbb{R}_+$. \square

3.2 Perturbation par une fonction réelle

Démontrer des résultats pour $-\Delta$, c'est bien, mais ce qui nous intéresse dans le cas de l'équation de Schrödinger, c'est lorsqu'on ajoute un potentiel V . L'opérateur de Schrödinger H correspond donc au Laplacien, perturbé par un certain opérateur de multiplication. Heureusement, ce genre de perturbation est facilement contrôlable, et en particulier, préserve le coté autoadjoint hérité de $-\Delta$. Tout cela est contenu dans un théorème, dit de Kato-Rellich.

3.2.1 Théorème de Kato-Rellich

Définition 3.2.1. (Bornée relativement) : Soit H un opérateur auto-adjoint et A un opérateur symétrique de même domaine \mathcal{D} . On dit que A est bornée par $\alpha \geq 0$ relativement à H si il existe $C > 0$ tel que :

$$\forall f \in \mathcal{D} \quad \|Af\| \leq \alpha \|Hf\| + C \|f\|$$

Théorème 3.2.1. (de Kato-Rellich) : Soit H un opérateur auto-adjoint, et A un opérateur symétrique bornée par $\alpha < 1$ relativement à H ($\|Af\| \leq \alpha\|Hf\| + C\|f\|$ pour tout $f \in \mathcal{H}$, $\alpha \geq 0$, $C > 0$), alors l'opérateur $K=H+A$ est auto-adjoint et $\mathcal{D}_K = \mathcal{D}_H$.

Preuve : Comme H est auto-adjoint, per [Spectre Autoadjoint](#), tout imaginaire pur non nul est dans la résolvante de H . On note $R(\pm i\lambda) = (H \pm i\lambda)^{-1}$. On considère la série $R_{\pm\lambda} = R(\pm i\lambda) \sum_{n=0}^{+\infty} (-AR(\pm i\lambda))^n$ pour un certain λ réel non nul. On a $\|R_{\pm\lambda}\| \leq \|R(\pm i\lambda)\| \sum_{n=0}^{+\infty} \|AR(\pm i\lambda)\|^n$. Pour montrer que $R_{\pm\lambda}$ converge, il faut montrer $\|AR(\pm i\lambda)\| < 1$.

Soit $g \in \mathcal{H}$ on pose $f := Rz(\pm i\lambda)g$, si $\alpha \neq 0$, on prend $\lambda \geq \frac{C}{\alpha}$ et $\lambda \geq C$ sinon. Soit $0 \leq \alpha < \beta < 1$ alors :

$$\begin{aligned} \|Af\|^2 &\leq (\alpha\|Hf\| + C\|f\|)^2 \\ &\leq \beta^2(\|Hf\|^2 + \lambda^2\|f\|^2) \\ &= \beta^2\|(H \pm i\lambda)f\|^2 \quad (\text{Voir lemme [Spectre auto-adjoint](#)}) \\ &= \beta^2\|g\|^2 \end{aligned}$$

Donc pour $\lambda \geq \frac{C}{\alpha}$, $\|AR(\pm i\lambda)\| \leq \beta < 1$, donc $R_{\pm\lambda}$ est convergente.

Comme $R(\pm i\lambda)$ est à valeur dans \mathcal{D}_H , $Im(R_{\pm\lambda}) = \mathcal{D}_H$. On vérifie de plus que $(K \pm i\lambda)R_{\pm\lambda} = \text{id}$ donc $Im(\lambda^{-1}K \pm i) = Im(\lambda(\lambda^{-1}K \pm i)) = Im(K \pm i\lambda) = \mathcal{H}$, ainsi $\lambda^{-1}K$ est auto-adjoint d'après le théorème [Critère auto-adjoint](#), donc K est auto-adjoint. \square

3.2.2 Inégalité de Hardy et application à l'opérateur de Schrödinger

Lemme 3.2.1. (Inégalité de Hardy) : Si $d > 2$ et $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$, alors on a l'inégalité de Hardy suivante :

$$\exists C > 0 \quad \left\| \frac{f}{|x|} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq C \|\nabla f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad (7)$$

Et la constante C ne dépend que de $d > 2$.

Preuve : Soit $u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $v \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$, une formule de Green (IPP) nous donne que :

$$\int_{\mathbb{R}^d} |u|^2 \operatorname{div} v \, dx = -2 \int_{\mathbb{R}^d} u \langle \nabla u, v \rangle \, dx$$

Soit $\epsilon > 0$, on pose $v_\epsilon(x) = \frac{x}{|x|^2 + \epsilon}$, alors, en utilisant l'égalité précédente et en passant à la limite grâce au théorème de la convergence dominée, on obtient :

$$\begin{aligned} (d-2) \int_{\mathbb{R}^d} \frac{|u|^2}{|x|^2} \, dx &= -2 \int_{\mathbb{R}^d} u \langle \nabla u, \frac{x}{|x|^2} \rangle \, dx \\ &\leq 2 \left(\int_{\mathbb{R}^d} \frac{|u|^2}{|x|^2} \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Inégalité de Hölder avec } p=2) \end{aligned}$$

d'où en divisant par $(\int_{\mathbb{R}^d} \frac{|u|^2}{|x|^2} \, dx)^{\frac{1}{2}}$:

$$\left\| \frac{u}{|x|} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq C \|\nabla u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad (\text{avec } C = \frac{2}{d-2} < +\infty)$$

On conclut ensuite en utilisant le [lemme de Friedrichs global](#), en raisonnant par densité et en utilisant l'inégalité de Fatou, pour montrer que c'est vrai pour toute fonction $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$. \square

Théorème 3.2.2. (Opérateur de Schrödinger autoadjoint) : Si $2 < d \leq 3$, l'opérateur $H = -\Delta + V$ avec $V : x \mapsto \frac{1}{|x|}$ est autoadjoint sur le domaine $H^2(\mathbb{R}^d)$.

Preuve : Introduisons une inégalité d'analyse simple mais astucieuse, soit $\epsilon > 0$ et $a, b \in \mathbb{R}$:

$$ab \leq \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon^2} a^2 + \epsilon^2 b^2 \right) \quad (8)$$

En effet : $(\frac{1}{\epsilon}a - \epsilon b)^2 = \frac{1}{\epsilon^2}a^2 + \epsilon^2b^2 - 2ab \geq 0$ d'où l'inégalité.

Soit $u \in H^2(\mathbb{R}^d)$, il existe $C > 0$ tel que $\|\frac{u}{|x|}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq C\|\nabla u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$. Soit $0 < \epsilon < \frac{\sqrt{2}}{C}$:

$$\begin{aligned} \|Vu\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 &\leq C^2 \|\nabla u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \quad (\text{Inégalité de Hardy}) \\ &= C^2 \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i=1}^d |\partial_i u|^2 \, dx \\ &= C^2 \sum_{i=1}^d \int_{\mathbb{R}^d} |\partial_i u|^2 \, dx \\ &= C^2 \sum_{i=1}^d \int_{\mathbb{R}^d} |x_i|^2 u^2 \, dx \quad (\text{Théorème de Plancherel}) \\ &\leq \frac{C^2}{2} \sum_{i=1}^d \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{1}{\epsilon^2} + \epsilon^2(|x_i|^4) \right) u^2 \, dx \\ &= \frac{3C^2}{2\epsilon^2} \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 + \frac{\epsilon^2 C^2}{2} \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i=1}^d (|x_i|^2 |u|)^2 \, dx \\ &= \frac{3C^2}{2\epsilon^2} \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 + \underbrace{\frac{\epsilon^2 C^2}{2}}_{< 1} \|-\Delta u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \end{aligned}$$

Comme $-\Delta$ est autoadjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$ par le théorème [\$-\Delta\$ autoadjoint](#), et V est un opérateur de multiplication donc symétrique, d'après le [Théorème de Kato-Rellich](#), $H = -\Delta + V$ est autoadjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$. \square

4 Etude du spectre essentiel perturbé

On s'est occupé du caractère autoadjoint de l'opérateur perturbé. Dans cette partie, on cherchera à montrer que le spectre essentiel est préservé lorsque la perturbation n'est pas trop compliquée. Cela demande cependant beaucoup de travail, notamment la démonstration du théorème de Weyl, qui sera fait en toute généralité, mais dont on utilisera un corollaire. On a besoin pour cela d'introduire les notions d'opérateurs compacts et de Hilbert-Schmidt. On en profitera pour démontrer le théorème spectral, qui répond à la question : "Peut-on, et comment diagonaliser des opérateurs autoadjoints?", qui est un théorème central en soi, mais qui nous sera également très utile dans la suite.

4.1 Classes d'opérateurs réguliers

Dans cette partie, on s'intéresse à des opérateurs plus réguliers que simplement bornés. Ces derniers ont la particularité d'avoir beaucoup de propriété agréable, que ce soit pour leur spectre, plus simple qu'un opérateur borné général, ou d'une propriété (alternative de Fredholm), qui permet d'avoir en dimension infinie, un résultat analogue à la dimension finie pour ces types d'opérateurs : le fait qu'ils sont surjectifs si et seulement si ils sont injectifs.

Il n'est pas forcément évident de montrer qu'un opérateur a cette propriété de régularité. Il existe en fait une notion plus forte et plus facile à vérifier (mais qui marche donc pour moins d'opérateurs), celle d'opérateur de Hilbert-Schmidt. Un cas particulièrement important : les opérateurs définis par des intégrales.

4.1.1 Opérateur compact

Définition 4.1.1. (Opérateur compact) Un opérateur A est dit **compact** si il envoie la boule unité (ou toute partie bornée) sur une partie relativement compacte. Une partie est relativement compacte si son adhérence est compact. De manière équivalente, un opérateur compact envoie toute suite bornée sur une suite ayant une valeur d'adhérence.

Remarque. : Un opérateur compact est en particulier borné, car la sphère est envoyée sur une partie bornée.

Lemme 4.1.1. (Fermeture des compacts) : On note $K(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs compacts de \mathcal{H} . $K(\mathcal{H})$ est un sous-espace vectoriel fermé de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$, stable par multiplication par un opérateur borné.

Preuve : On démontre facilement que $K(\mathcal{H})$ est un espace vectoriel par la caractérisation avec les suites. Soit T_n une suite d'opérateurs compacts convergente vers T et $\epsilon > 0$. Il existe $n \in \mathbb{N}$ tel que $\|T - T_n\| < \frac{\epsilon}{2}$. T_n est compact donc $T_n(B(0, 1))$ est relativement compacte. On considère le recouvrement de $F := \overline{T_n(B(0, 1))} \subset \bigcup_{y \in F} B(y, \frac{\epsilon}{2})$ et on extrait un sous-recouvrement fini donné par $B(y_i, \frac{\epsilon}{2})$ pour i allant de 1 à N_ϵ . Soit $x \in B(0, 1)$. Il existe y_i tel que $\|T_n x - y_i\| < \frac{\epsilon}{2}$. Alors $\|Tx - y_i\| \leq \|Tx - T_n x\| + \|T_n x - y_i\| < \epsilon$. Donc $T(B(0, 1)) \subset \bigcup_{i=1}^{N_\epsilon} B(y_i, \frac{\epsilon}{2})$, ce qui montre que $T(B(0, 1))$ est précompacte, donc $\overline{T(B(0, 1))}$ compact car \mathcal{H} est complet. Si T est compact, B_1, B_2 borné et x_n une suite bornée, $B_2 x_n$ est une suite bornée, donc $T B_2 x_n$ admet une valeur d'adhérence. Enfin, B_1 étant borné, $B_1 T B_2 x_n$ admet également une valeur d'adhérence, d'où $B_1 T B_2$ compact. \square

Certains types d'opérateurs sont simples et pourtant aussi importants. C'est le cas des opérateurs de rang fini, qui peuvent se visualiser comme des matrices plongées dans un espace de dimension infinie, c'est à dire des matrices dont leur suite de coefficients est nulle sauf pour un nombre fini. La définition suivante nous montrera alors que les "matrices infinies" représente en fait les opérateurs compacts, qui seront le bon cadre pour les théorèmes qui suivront.

Définition 4.1.2. (Rang fini) Un opérateur A est dit de **rang fini** si son image est de dimension finie.

Lemme 4.1.2. (Rang fini - limite) : Toute limite d'une suite d'opérateur de rang fini est compact. On a de plus que les opérateurs de rang fini sont denses dans $K(\mathcal{H})$.

Preuve : Si A est un opérateur de rang finie, son image est de dimension finie, et $\overline{A(B(0, 1))}$ est un fermé borné de l'image de A , donc est compact. Donc A est compact. D'après **Fermeture des compacts**, $K(\mathcal{H})$ est fermé, donc toute limite d'opérateur de rang fini est compacte. Le deuxième point est vrai dans un espace de Hilbert, mais on en n'aura pas besoin, donc on passe la démonstration. \square

Petit détour vers la théorie de Fredholm, qui ne sera que très peu développée. Bien que le théorème suivant soit déjà un niveau bien avancé, on ne l'utilisera que très peu (mais de manière crucial) dans la démonstration du théorème de Weyl. C'est ce théorème (ou sa version analytique) qui nous donne en particulier "l'alternative de Fredholm" suivante, si T est un opérateur compact, et $\lambda \neq 0$, :

$$T - \lambda \text{id} \quad \text{est soit non injectif, soit surjectif}$$

Autrement dit, il est injectif, si et seulement si il est surjectif.

Théorème 4.1.1. (Méromorphe de Fredholm) : Soit $\Omega \subset \mathbb{C}$ un ouvert connexe et $A : z \mapsto A(z)$ une fonction méromorphe sur Ω à valeurs dans l'ensemble des opérateurs de \mathcal{H} . A est holomorphe sur $\Omega \setminus D$, où D est une partie isolée de Ω . On suppose que $A(z)$ est un opérateur compact pour tout $z \in \Omega \setminus D$ et que ses coefficients d'indice négatif dans sa série de Laurent sont des opérateurs de rang fini. Alors soit :

- (a) $\text{id} - A(z)$ n'est inversible pour aucun $z \in \Omega \setminus D$
ou bien
(b) il existe $D' \subset \Omega$ isolé tel que $\text{id} - A(z)$ est inversible si $z \notin D \cup D'$. De plus $\text{id} - A(z)$ se prolonge en une fonction méromorphe sur $\Omega \setminus D'$ dont les coefficients d'indice négatif de sa série de Laurent sont des opérateurs de rang fini.

Preuve : Pour démontrer ce théorème, comme Ω est connexe, il suffit de vérifier que pour tout $z_0 \in \Omega$ on a (a) ou (b) dans un voisinage N de z_0 . Commençons par le cas $z_0 \in \Omega \setminus D$.

$z \mapsto A(z)$ est continue, on choisit η tel que si $\|z - z_0\| < \eta$ alors $\|A(z) - A(z_0)\| < \frac{1}{2}$. $A(z_0)$ est compact, donc par **rang fini**, il existe un opérateur de rang fini F tel que $\|A(z_0) - F\| < \frac{1}{2}$. Soit z tel que $\|z - z_0\| < \eta$. Par inégalité triangulaire, $\|A(z) - F\| < 1$.

Alors $(\text{id} - A(z) + F)^{-1}$ existe et est analytique. F étant de rang fini, il existe $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{H}$ linéairement indépendant et des formes linéaires continues h_1, \dots, h_n sur \mathcal{H} telles que pour tout $x \in \mathcal{H}$, $F(x) = \sum_{i=1}^n h_i(x)x_i$. Comme \mathcal{H} est un Hilbert, le **théorème de Riesz** nous dit que, pour tout $i \leq n$, il existe $\Phi_i \in \mathcal{H}$ tel que $h_i(x) = \langle \Phi_i, x \rangle$. Donc $F(x) = \sum_{i=1}^n \langle \Phi_i, x \rangle x_i$.

On pose pour tout $i \leq n$:

$$P_i(z) = ((\text{id} - A(z) + F)^{-1})^* \Phi_i \in \mathcal{H} \quad (9)$$

$$g : z \mapsto F(\text{id} - A(z) + F)^{-1} = \sum_{i=1}^n \langle P_i(z), (\cdot) \rangle x_i. \quad (10)$$

En notant $B = (\text{id} - A(z) + F)$ on voit immédiatement que $(\text{id} - FB^{-1})B = \text{id} - A(z)$. Donc $(\text{id} - A(z))$ est inversible si et seulement si $(\text{id} - FB^{-1}) = (\text{id} - g(z))$ est inversible. Or $g(z)$ est un opérateur de rang fini, donc les deux sont non inversibles si et seulement si ils sont non injectifs, c'est à dire qu'il existe $x \in \mathcal{H}$ non nul tel que $g(z)x = x$ si et seulement si il existe $x' \in \mathcal{H}$ non nul tel que $A(z)x' = x'$, autrement dit, ils ont tous les deux 1 comme valeur propre.

Supposons alors qu'il existe $x \in \mathcal{H}$ tel que $g(z)x = x$. Par (10), on a $x = \sum_{i=1}^n \langle P_i(z), x \rangle x_i$. Notons $\beta_i = \langle P_i(z), x \rangle$. On a alors l'identité suivante, pour tout $i \leq n$:

$$\beta_i = \sum_{j=1}^n \langle P_i(z), x_j \rangle \beta_j \quad (11)$$

En effet, si $i \leq n$ on a $\sum_{j=1}^n \langle P_i(z), x_j \rangle \beta_j = \langle P_i(z), \sum_{j=1}^n \beta_j x_j \rangle = \langle P_i(z), x \rangle = \beta_i$. Réciproquement, si une famille $(\beta_1, \dots, \beta_n) \in \mathcal{H}^n$ vérifie (3) alors $x = \sum_{i=1}^n \beta_i x_i$ est non nul et vérifie $g(z)x = x$.

$g(z)$ à 1 pour valeur propre si et seulement si $d(z) := \det(\delta_{i,j} - \langle P_i(z), x_j \rangle) = 0$. Or la fonction $z \mapsto \langle P_i(z), x_j \rangle$ est holomorphe sur $B(z_0, \eta)$ donc $d(z)$ également. Par le principe des zéros isolés, $S_\eta := B(z_0, \eta) \cap \det^{-1}(0)$ est isolé, ou bien $S_\eta = B(z_0, \eta) \cap \det^{-1}(0) = B(z_0, \eta)$. Dans ce second cas, $\text{id} - g(z)$ est donc non injectif pour tout $z \in B(z_0, \eta)$, donc $\text{id} - A(z)$ également, d'où (a). Dans l'autre cas, pour tout $z \in B(z_0, \eta) \setminus S_\eta$, on a $d(z) \neq 0$ donc

$\text{id} - g(z)$ injectif et $\text{id} - A(z)$ est inversible d'où (b). Comme dans ce cas là, $\text{id} - g(z)$ est également surjectif, si $y \in \mathcal{H}$ on peut trouver $x \in \mathcal{H}$ tel que $x - g(z)x = y$, l'unique solution pour x est alors $x = y + \sum_{i=1}^n \beta_i x_i$, avec β_i vérifiant :

$$\beta_i = \langle P_i(z), x \rangle + \sum_{j=1}^n \langle P_i(z), x_j \rangle \beta_j \quad (12)$$

Comme $\text{id} - A(z) = (\text{id} - g(z))B$ et B analytique, on a que $(\text{id} - A(z))^{-1}$ a des pôles exactement sur les $z \in \det^{-1}(0)$, donc est méromorphe sur $B(z_0, \eta)$. Le calcul de ses résidus se fait à partir de l'expression (12), comme les résidus de A sont des opérateurs de rang fini, les différentes multiplications préservent le fait que le rang est fini.

Faisons le cas où $z_0 \in D$. On peut écrire au voisinage de z_0 , pour tout z assez proche de z_0 :

$$A(z) = \sum_{i=1}^k A_{-i}(z - z_0)^{-i} + G(z)$$

La fonction $z \mapsto G(z)$ est holomorphe dans un voisinage de z_0 et $G(z)$ est compact. On peut refaire le même argument que précédemment, et trouver un voisinage N et un opérateur de rang fini F tel que $\|G(z) - G(z_0)\| < \frac{1}{2}$ et $\|G(z) - F\| < \frac{1}{2}$, pour tout $z \in N$. Posons si $z \in N$:

$$F(z) = \sum_{i=1}^k A_{-i}(z - z_0)^{-i} + F$$

Alors $\|A(z) - F(z)\| < 1$ donc $B(z) = \text{id} - A(z) + F(z)$ est inversible et d'inverse analytique. On pose ensuite $\text{id} - A(z) = \underbrace{(\text{id} - F(z)G(z))}_{:= g(z)} B(z)$, et on raisonne sur $z \mapsto g(z)$ de la même façon que la preuve précédente. \square

4.1.2 Théorème Spectral

On en arrive enfin à ce théorème central, qui va nous permettre de diagonaliser des opérateurs compacts autoadjoint de manière très satisfaisante. La démonstration repose sur quelques lemmes préliminaires, ainsi que l'utilisation du lemme de Zorn, qu'on rappellera le moment venu.

Lemme 4.1.3. (Norme d'un opérateur autoadjoint borné) : Soit \mathcal{H} un espace de Hilbert non nul et $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ un opérateur autoadjoint borné. Alors

$$\|T\| = \sup_{\|x\|=1} |\langle Tx, x \rangle|$$

Preuve : On pose $\alpha := \sup\{|\langle Tx, x \rangle| ; x \in \mathcal{H} \text{ et } \|x\| = 1\} > -\infty$ car \mathcal{H} est non nul. l'Inégalité de Cauchy-Schwarz nous donne que $\alpha \leq \|T\|$.

Soit $x, y \in \mathcal{H}$, comme T est autoadjoint,

$$\begin{aligned} \langle T(x+y), x+y \rangle &= \langle Tx, x \rangle + 2\text{Re}\langle Tx, y \rangle + \langle Ty, y \rangle \\ \text{et } \langle T(x-y), x-y \rangle &= \langle Tx, x \rangle - 2\text{Re}\langle Tx, y \rangle + \langle Ty, y \rangle \end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned} 4\text{Re}\langle Tx, y \rangle &\leq \langle T(x+y), x+y \rangle + \langle T(x-y), x-y \rangle \\ &\leq \alpha^2(\|x+y\|^2 + \|x-y\|^2) \\ &\leq 2\alpha^2(\|x\|^2 + \|y\|^2) \end{aligned}$$

On prend alors x tel que $\|x\| = 1$ et $Tx \neq 0$ et $y = \frac{Tx}{\|Tx\|}$, ce qui donne $4\|Tx\|^2 \leq 4\alpha^2$, on passe ensuite au sup sur les x tel que $\|x\| = 1$ et $Tx \neq 0$, d'où $\|T\| \leq \alpha$. \square

Lemme 4.1.4. (Valeur propre compacte autoadjointe) : Si T est un opérateur compact autoadjoint de \mathcal{H} , alors $\|T\|$ ou $-\|T\|$ est une valeur propre de T .

Preuve : On pose $\alpha := \sup\{\langle Tx, x \rangle ; x \in \mathcal{H} \text{ et } \|x\| = 1\}$. On peut supposer $\alpha \neq 0$, sinon $T = 0$. Soit (x_n) une suite de \mathcal{H} tel que $\|x_n\| = 1 \quad \forall n \in \mathbb{N}$, et $\langle Tx_n, x_n \rangle \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \alpha$. Comme T est continue, d'après le [lemme sur la norme](#), $\alpha = \pm\|T\|$

$$\begin{aligned} \|(T - \alpha \text{id})x_n\|^2 &= \|Tx_n\|^2 + \alpha^2\|x_n\|^2 - 2\alpha\langle Tx_n, x_n \rangle \\ &\leq \alpha^2 + \alpha^2 - 2\alpha\langle Tx_n, x_n \rangle \end{aligned}$$

D'où $(T - \alpha \text{id})x_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{H}} 0$.

Comme T est compact, quitte à extraire une sous-suite on peut supposer que (Tx_n) converge vers $x \in \mathcal{H}$. Alors $\alpha x_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{H}} x \neq 0$. Par passage à la limite, l'égalité $T(\alpha x_n) = \alpha Tx_n$ donne $Tx = \alpha x$. Donc $\alpha = \pm\|T\|$ est valeur propre de T . \square

Lemme 4.1.5. (Espace stable) : Soit T un opérateur borné autoadjoint. Si $E \subset \mathcal{H}$ est un sous espace stable par T , alors E^\perp est également stable par T .

Preuve : Soit $x \in E^\perp$. Soit $y \in E$, comme T est autoadjoint par hypothèse, $\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle = 0$ car $Ty \in E$ par hypothèse. D'où E^\perp stable par T . \square

Théorème 4.1.2. (Théorème spectrale) : Soit T un opérateur compact et autoadjoint sur \mathcal{H} . Il existe une base orthonormée $(e_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de \mathcal{H} (au sens de base Hilbertienne) et une suite $(\lambda_n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}}$ telles que

- (1) $Te_n = \lambda_n e_n \quad \forall n \in \mathbb{N}$
- (2) $\lambda_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0$

De plus, pour tout $x \in \mathcal{H}$

$$Tx = \sum_{n \in \mathbb{N}} \lambda_n \langle x, e_n \rangle e_n$$

Preuve : On note \mathcal{B} l'ensemble des parties U qui vérifient :

$$\begin{cases} \forall x \in U \quad \|x\| = 1 \\ \forall x, y \in U \quad x \neq y \implies \langle x, y \rangle = 0 \\ \forall x \in U \quad \exists \lambda \in \mathbb{C} \quad Tx = \lambda x \end{cases}$$

On y ajoute l'ordre naturel de l'inclusion \subset des parties. D'après le [lemme Valeur propre compact autoadjointe](#), $\|T\|$ ou $-\|T\|$ est une valeur propre de T , associée au vecteur propre unitaire $x \in \mathcal{H}$. Donc \mathcal{B} est non vide car contient $\{x\}$. Montrons que (\mathcal{B}, \subset) est un ensemble inductif, c'est à dire que toute partie totalement ordonnée admet un majorant.

Soit $\mathcal{A} = \{B_i \in \mathcal{B} \mid i \in I\}$ une partie totalement ordonnée pour \subset . Montrons que $\bigcup_{i \in I} B_i$ est un majorant de \mathcal{A} , il suffit de vérifier que $\bigcup_{i \in I} B_i \in \mathcal{B}$. Le premier et le dernier point sont immédiats.

Soit $x, y \in \bigcup_{i \in I} B_i$ tel que $x \neq y$, il existe $i, j \in I$ tel que $x \in B_i$ et $y \in B_j$. Comme \mathcal{A} est totalement ordonnée, on a $B_j \subset B_i$ ou bien $B_i \subset B_j$, donc $x, y \in B_j$ ou $x, y \in B_i$, et comme $x \neq y$ et $B_i, B_j \in \mathcal{B}$, $\langle x, y \rangle = 0$.

Donc $\bigcup_{i \in I} B_i \in \mathcal{B}$. \mathcal{B} est donc inductif. On utilise alors le lemme de Zorn, qu'on énonce dessous, mais qu'on ne s'ennuiera pas à démontrer, la preuve utilisant l'axiome du choix et est complètement hors sujet.

Lemme 4.1.6. (Lemme de Zorn) : *Tout ensemble inductif admet un élément maximal.*

\mathcal{B} admet donc un élément maximal $B \in \mathcal{B}$. Alors B est un système de vecteurs orthonormés, qui sont des vecteurs propres de T . Montrons alors que B est une base Hilbertienne (ou base orthonormée) de \mathcal{H} . On pose $H_0 = \text{Vect}(B)^\perp$, et on suppose que $H_0 \neq \{0\}$. Comme T est autoadjoint et borné et que $\text{Vect}(B)$ est stable par T , par [Espace stable](#), H_0 est stable par T . On peut restreindre T à H_0 , qu'on note $T_0 : H_0 \rightarrow H_0$, qui est un opérateur autoadjoint et compact. H_0 est un espace de Hilbert, car fermé dans \mathcal{H} , et est par hypothèse non nul, on peut appliquer le [lemme Valeur propre compact autoadjointe](#), T_0 possède une valeur propre $|\lambda| = \|T\|$ associé à un vecteur propre $v_0 \neq 0$. Mais alors $B \subset B \cup \{v_0\} \in \mathcal{B}$, ce qui contredit que B est maximal, donc $H_0 = \{0\}$, d'où $\overline{\text{Vect}(B)} = \mathcal{H}$.

Comme \mathcal{H} est séparable (supposé dans la définition de [espace de Hilbert](#)), cette base B est dénombrable. On écrit $B = \{e_n \mid n \in \mathbb{N}\}$. Soit $x \in \mathcal{H}$ et $m > k \geq 0$, on a :

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{n=k}^m \lambda_n \langle x, e_n \rangle e_n \right\|^2 &= \sum_{n=k}^m |\lambda_n \langle x, e_n \rangle|^2 \\ &\leq \|T\|^2 \sum_{n=k}^m |\langle x, e_n \rangle|^2 \rightarrow 0 \quad \text{quand } k, m \rightarrow +\infty \end{aligned}$$

Donc la suite des sommes partielles est de Cauchy, donc converge car \mathcal{H} est complet. Ainsi la série des $\sum_{n=k}^m \lambda_n \langle x, e_n \rangle e_n$ converge dans \mathcal{H} .

Pour tout $x \in \mathcal{H}$ et $m \geq 0$, on a :

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{n=0}^m \lambda_n \langle x, e_n \rangle e_n \right\|^2 &\leq \|T\|^2 \sum_{n=0}^m |\langle x, e_n \rangle|^2 \\ &\leq \|T\|^2 \|x\|^2 \end{aligned}$$

On pose $Lx = \sum_{n \in \mathbb{N}} \lambda_n \langle x, e_n \rangle e_n$, alors, en passant à la limite dans la dernière inégalité, on a que L est un opérateur linéaire borné, et si $n \in \mathbb{N}$, $Le_n = \lambda_n e_n = Te_n$. L et T sont deux applications linéaires qui coïncident sur une base $(e_n)_{n \in \mathbb{N}}$, donc sont égaux sur $\text{Vect}(B)$ qui est dense dans \mathcal{H} , et par continuité de L et T , $T = L$ sur \mathcal{H} tout entier.

Montrons enfin le point (2). Soit $\delta > 0$ tel que $\forall m \in \mathbb{N}, \exists n > m, |\lambda_n| \geq \delta$. On peut supposer $\lambda_n \neq 0$ pour tout $n \in \mathbb{N}$, en effet, si la suite tend vers 0, on a rien à faire, sinon, il suffit d'extraire une sous-suite dont chaque terme est non nul. On note $x_n \in \mathcal{H}$ un vecteur propre associé à λ_n et on pose $H_n = \text{Vect}\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$. Alors $T(H_n) \subset H_n$ et $(T - \lambda_n \text{id})H_n \subset H_{n-1}$. On construit par le procédé d'orthonormalisation de Gram-Schmidt, une suite $(e_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tel que $\|e_n\| = 1$ et $e_n \perp H_{n-1}$. Soit $m \in \mathbb{N}$, et $n > m$ tel que $|\lambda_n| \geq \delta$,

$$\begin{aligned} Te_n - Te_m &= \lambda_n e_n + \underbrace{(Te_n - \lambda_n e_n) - Te_m}_{\in H_{n-1}} \\ \|Te_n - Te_m\| &\geq \inf_{z \in H_{n-1}} \|\lambda_n e_n + z\| = \|\lambda_n e_n\| = |\lambda_n| \geq \delta \end{aligned}$$

Donc la suite $(Te_n)_{n \in \mathbb{N}}$ n'a pas de valeur d'adhérence, or $(e_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est borné, ce qui contredit que T est un opérateur compact. Donc, pour tout $\delta > 0$, il existe un $m \in \mathbb{N}$ tel que pour tout $n > m$, $|\lambda_n| < \delta$, d'où $\lambda_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ \square

4.1.3 Espace de Hilbert-Schmidt

Les opérateurs de Hilbert-Schmidt sont une classe d'opérateurs encore plus régulier que les compacts. Ils sont particulièrement utiles car définissent souvent des opérateurs à noyau (à intégrale), et il est relativement facile de montrer qu'un opérateur à noyau est de Hilbert-Schmidt, pour en déduire qu'il est compact. Cette technique est si utile, que c'est en fait la stratégie à adopter pour déterminer le spectre essentiel perturbé. C'est ce qu'on va faire lors de l'application du corollaire du théorème de Weyl.

Définition 4.1.3. (Hilbert-Schmidt) : Un opérateur borné A de \mathcal{H} est dit de Hilbert-Schmidt si il vérifie :

$$\|A\|_{HS}^2 := \sum_{i \in I} \|Ae_i\|^2 < +\infty$$

Où $(e_i)_{i \in I}$ est une base orthonormée de \mathcal{H} . On note $\mathcal{I}(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs de Hilbert-Schmidt de \mathcal{H} appelé **Espace de Hilbert-Schmidt**.

On peut vérifier que cette définition ne dépend pas du choix de la base orthonormée $(e_i)_{i \in I}$, en effet si $(e_i)_{i \in I}, (f_j)_{j \in I}$ sont deux bases orthonormées, A étant borné, son adjoint est défini sur tout \mathcal{H} et :

$$\begin{aligned} \sum_{i \in I} \|Ae_i\|^2 &= \sum_{i, j \in I} |\langle Ae_i, f_j \rangle|^2 \\ &= \sum_{i, j \in I} |\langle e_i, A^* f_j \rangle|^2 \\ &= \sum_{j \in I} \|A f_j\|^2 \end{aligned}$$

Lemme 4.1.7. (Hilbert-Schmidt compact) : Tout opérateur de Hilbert-Schmidt est compact. Les opérateurs de rang fini sont, de plus, denses dans $\mathcal{I}(\mathcal{H})$

Preuve : Soit A un opérateur de HS, soit $(e_i)_{i \in \mathbb{N}}$ une base orthonormée. On considère une famille finie de cette base (e_1, \dots, e_n) et $f \in \{e_1, \dots, e_n\}^\perp$ tel $\|f\| = 1$. Alors comme (e_1, \dots, e_n, f) est une famille libre orthonormée et :

$$\|Af\|^2 \leq \|A\|_{HS}^2 - \sum_{i=1}^n \|Ae_i\|^2 < +\infty \text{ par hypothèse}$$

Or comme $\sum_{i=1}^n \|Ae_i\|^2 \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \sum_{i=1}^{+\infty} \|Ae_i\|^2 = \|A\|_{HS}^2$, on a que : $\sup_{f \in \{e_1, \dots, e_n\}^\perp, \|f\|=1} \|Af\| \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$. On pose $A_n := \sum_{i=1}^n \langle e_i, \cdot \rangle Ae_i$ qui est un opérateur de rang fini. On a alors montré que $\|A_n - A\| \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$, d'après le lemme [Fermeture des compacts](#), A est compact. Le même argument montre que les opérateurs de rang finis sont denses dans $\mathcal{I}(\mathcal{H})$. \square

Lemme 4.1.8. (Opérateur à noyau) : On se place sur $\mathcal{H} = L^2(\Omega)$ où $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est ouvert. Un opérateur borné A est de Hilbert-Schmidt sur \mathcal{H} si et seulement si il existe une fonction $K \in L^2(\Omega \times \Omega)$ (munie de la mesure produit) tel que pour tout $f \in \mathcal{H}$:

$$(Af)(x) = \int_{\Omega} K(x, y) f(y) \, dy$$

$(x, y) \mapsto K(x, y)$ est appelé *noyau intégral* de A .

Preuve : Soit $K \in L^2(\Omega \times \Omega)$, on considère $A : f \in L^2(\Omega) \mapsto (x \mapsto \int_{\Omega} K(x, y) f(y) \, dy)$. C'est un opérateur linéaire bien défini et on peut calculer sa norme d'opérateur, si $f \in L^2(\Omega)$:

$$\|Af\|^2 = \int_{\Omega} \left(\int_{\Omega} K(x, y) f(y) \, dy \right)^2 dx$$

Comme K est intégrable sur Ω^2 , le théorème de Fubini-Lebesgue nous assure que $x \mapsto \int_{\Omega} K(x, y) f(y) \, dy$ est intégrable pour

tout presque tout $y \in \Omega$, ainsi par Cauchy-Schwarz :

$$\begin{aligned} \|Af\|^2 &\leq \int_{\Omega} \left(\int_{\Omega} K^2(x,y) dy \int_{\Omega} f^2(y) dy \right) dx \\ &= \int_{\Omega^2} K^2(x,y) dx dy \int_{\Omega} f^2(y) dy \quad (\text{Fubini-Lebesgue}) \\ &= \|K\|_{L^2(\Omega^2)} \|f\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

Donc, A est un opérateur borné. Si (e_n) est une base orthonormée de $L^2(\Omega)$, alors $(e_n \overline{e_m})_{n,m \geq 1}$ est une base orthonormée de $L^2(\Omega \times \Omega)$. On écrit $K = \sum_{n,m \geq 1} k_{n,m} e_n \overline{e_m}$ alors $K_N = \sum_{n,m=1}^N k_{n,m} e_n \overline{e_m}$ est le noyau d'un opérateur de rang fini A_{K_N} . On a $K_N \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{L^2} K$, et comme $\|A\| \leq \|K\|_{L^2}$ d'après le calcul au dessus, on a $A_{K_N} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} A_K$. A_K est donc compact, et une intersion somme intégrale qu'on justifie par convergence dominée grâce au fait que $K^2 \in L^1(\Omega^2)$ donne que $\|A\|_{HS}^2 = \|K\|_{L^2(\Omega^2)}^2 < +\infty$. Pour la réciproque, on vient de montrer que $K \mapsto A_K$ est une isométrie de $L^2(\Omega^2)$ dans $\mathcal{S}(\mathcal{H})$, son image est donc fermée, et contient tous les opérateurs de rang fini, qui sont denses dans $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ d'où la réciproque. \square

4.2 Théorème de Weyl

Enfin nous arrivons à ce fameux théorème, commençons immédiatement par l'énoncer :

Théorème 4.2.1. (de Weyl) : *Soit A un opérateur auto-adjoint et B opérateur fermé vérifiant :*

- (1) *Il existe $z \in \rho(B) \cup \rho(A)$ tel que $(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1}$ soit compact*
- (2) *$\sigma(A) \neq \mathbb{R}$ et $\rho(B) \neq \emptyset$ ou bien $\rho(B)$ intersecte les deux demi-plans complexe supérieur et inférieur*

Alors $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$

4.2.1 Preuve du théorème

La preuve n'est pas facile, et demande beaucoup de préparation. En particulier, on a besoin de notion d'analyse complexe, car on utilisera le théorème des résidus (la version pour les fonctions méromorphes valuées, c'est à dire que nos fonctions seront des séries de Laurent dont les coefficients sont des opérateurs), il y a de plus dans tous les lemmes, beaucoup de petits résultats topologiques.

Il y a essentiellement deux parties, la première basée sur l'analyse complexe et les fonctions holomorphes, qui nous dira que la forme de la résolvante est une fonction méromorphe dont les résidus sont des opérateurs de rang fini.

La seconde partie est topologique, des arguments de connexité dans \mathbb{C} , et on utilisera le résultat sur les résidus de la résolvante.

Lemme 4.2.1. *Soit A un opérateur fermé. Alors $z \mapsto (A - z)^{-1}$ est une fonction méromorphe sur $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(A)$ et ses singularités sont dans $\sigma_{disc}(A)$. De plus, les coefficients d'indice négatif dans sa série de Laurent sont des opérateurs de rang fini.*

Preuve : D'après le lemme de l'Equation de la résolvante, $z \mapsto R(z) = (A - z \text{id})^{-1}$ est analytique sur $\mathbb{C} \setminus \sigma(A)$. Soit $z_0 \in \sigma_{disc}(A)$, c'est un point isolé, donc $(A - z_0 \text{id})$ est analytique sur $B(z_0, r) \setminus \{z_0\}$ pour un certain $r > 0$. Soit $z \in B(z_0, r) \setminus \{z_0\}$, $R(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n (z - z_0)^n$ où b_{-n} sont les résidus de $R(z)$ en z_0 .

On va démontrer que pour tout $n \geq 2$:

$$b_{-n} = -(-b_{-2})^{n-1} \tag{13}$$

$$b_{-1}^2 = -b_{-1} \tag{14}$$

On va montrer un résultat intermédiaire, et une récurrence simple nous permettra de démontrer (5) et (6).

$$b_n b_m = (\eta_n + \eta_m - 1) b_{n+m+1} \quad \forall n, m \in \mathbb{Z} \text{ avec :}$$

$$\eta_n = \begin{cases} 1 & \text{si } n \geq 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

$z \mapsto R(z)$ est une fonction méromorphe à valeur dans les opérateurs de \mathcal{H} . D'après la formule de Cauchy pour les dérivées n-ième, si on choisit $0 < \epsilon < r$, alors pour tout $n \in \mathbb{Z}$:

$$b_n = \frac{1}{2i\pi} \int_{C_\epsilon} \frac{R(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz$$

Avec $C_\epsilon = C(z_0, \epsilon)$.

Soit $n, m \in \mathbb{Z}$, calculons $b_n b_m$, soit $0 < \epsilon' < \epsilon < r$:

$$\begin{aligned} b_n b_m &= \frac{1}{(2i\pi)^2} \int_{C_\epsilon} \frac{R(z)}{(z - z_0)^{n+1}} \int_{C_{\epsilon'}} \frac{R(w)}{(w - z_0)^{m+1}} dw dz \\ &= \frac{1}{(2i\pi)^2} \int_{C_\epsilon} \int_{C_{\epsilon'}} \frac{R(z)R(w)}{(z - z_0)^{n+1}(w - z_0)^{m+1}} dw dz \quad (\text{Linéarité des opérateurs}) \\ &= \frac{1}{(2i\pi)^2} \int_{C_\epsilon} \int_{C_{\epsilon'}} \frac{R(z) - R(w)}{(w - z)(z - z_0)^{n+1}(w - z_0)^{m+1}} dw dz \quad (\text{Equation des résolvantes}) \\ &= \frac{1}{(2i\pi)^2} \int_{C_\epsilon} \int_{C_{\epsilon'}} \frac{R(z)}{(w - z)(z - z_0)^{n+1}(w - z_0)^{m+1}} dw dz \\ &\quad - \frac{1}{(2i\pi)^2} \int_{C_{\epsilon'}} \int_{C_\epsilon} \frac{R(w)}{(w - z)(z - z_0)^{n+1}(w - z_0)^{m+1}} dz dw \\ &= \frac{1}{(2i\pi)^2} \int_{C_\epsilon} \frac{R(z)}{(z - z_0)^{n+1}} \int_{C_{\epsilon'}} \frac{1}{(w - z)(w - z_0)^{m+1}} dw dz \\ &\quad - \frac{1}{(2i\pi)^2} \int_{C_{\epsilon'}} \frac{R(w)}{(w - z_0)^{m+1}} \int_{C_\epsilon} \frac{1}{(w - z)(z - z_0)^{n+1}} dz dw \end{aligned}$$

On se ramène donc à un calcul de résidus. Soit $z, z_0 \in \mathbb{C}$ distinct, et $0 < |z - z_0| < \epsilon$. Soit $m \in \mathbb{Z}$ On pose :

$$f : B(z_0, \epsilon) \longrightarrow \mathbb{C}$$

$$z \longmapsto \frac{1}{(w - z)} \frac{1}{(w - z_0)^{m+1}}$$

Qui ne possède qu'un seul pôle (en z_0) d'ordre $m+1$ si et seulement si $m+1 \geq 1 \iff m \geq 0$. Alors par le théorème des résidus on a :

$$\begin{aligned} \int_{C_{\epsilon'}} \frac{1}{(w - z)(w - z_0)^{m+1}} dw &= 2i\pi \frac{(-1)^m}{(z_0 - z)^{m+1}} \text{ si } m \geq 0 \text{ et } 0 \text{ sinon} \\ &= 2i\pi \frac{1}{(z - z_0)^{m+1}} (\eta_m - 1) \end{aligned}$$

De la même façon, on détermine les résidus de la fonction $z \mapsto \frac{1}{(w - z)(z - z_0)^{n+1}}$, qui a, soit un seul pôle, w , si $n < 0$, et deux sinon. Alors :

$$\int_{C_\epsilon} \frac{1}{(w - z)(z - z_0)^{n+1}} dz = 2i\pi \frac{-1}{(w - z_0)^{n+1}} (\eta_n)$$

En écrivant les deux intégrales avec une variable commune, on obtient alors immédiatement le résultat intermédiaire. La récurrence permettant de démontrer (13) et (14) est directe.

Prochaine étape : on pose $N = -b_{-2}$ et $P = -b_{-1}$, l'identité (13) nous donne immédiatement :

$$NP = PN = N \tag{15}$$

La série $\sum_{n=-\infty}^0 b_n z^n$ est absolument convergente dès que $z \neq 0$ donc $\sum_{n=0}^{+\infty} N z^n$ aussi, et vérifie $(\sum_0^{+\infty} N z^n)(1 - \lambda N) = \text{id}$, pour tout $z \in B(z_0, r) \setminus \{0\}$. Donc, comme cet inverse est également borné, on a $\sigma(N) = \{0\}$. Or, comme $z_0 \in \sigma_{disc}(A)$, z_0 est une valeur propre de multiplicité finie, donc P est de rang fini. Si $y \in \text{Im}(N)$ alors $Nx = y$ pour un certain $x \in \mathcal{H}$ et par (15), $PNx = y$ d'où $\text{Im}(N) \subset \text{Im}(P)$, donc N est de rang fini, et par la relation (13), tous les b_n sont des opérateurs de rang fini. Si on restreint N à $\text{Im}(P)$, alors l'opérateur NP est de rang finis, et n'a que 0 comme valeur propre, donc est nilpotent, il existe $k \in \mathbb{N}$ tel que $N^k = (NP)^k = 0$. On conclut que si $n \geq k + 1$, alors $b_n = 0$. Donc $z \mapsto R(z)$ est méromorphe et a ses pôles en $\sigma_{disc}(A)$. \square

Lemme 4.2.2. (Spectre de la résolvante) : Si A est un opérateur fermé de \mathcal{H} , soit $z_0 \in \rho(A)$, alors si $z \neq 0$, $z \in \sigma_{ess}(R(z_0)) \iff z_0 + z^{-1} \in \sigma_{ess}(A)$, $0 \in \sigma_{ess}(R(z_0))$ si et seulement si A est non borné.

Preuve : Soit $z_0 \in \rho(A)$. Commençons par montrer $z \in \sigma(R(z_0)) \iff z_0 + z^{-1} \in \sigma(A)$ (pour z non nul). Si $z \neq 0$:

$$\begin{aligned} R(z_0) - z \text{id} &= (\text{id} - z(A - z_0 \text{id}))R(z_0) \\ &= (A - (z^{-1} + z_0))(-zR(z_0)) \end{aligned}$$

Supposons $z \notin \sigma(R(z_0))$, alors ce calcul montre que $(A - (z^{-1} + z_0))^{-1} = -zR(z_0)(R(z_0) - z)^{-1}$ cette inverse est donc borné, d'où $z^{-1} + z_0 \notin \sigma(A)$.

Supposons $z^{-1} + z_0 \notin \sigma(A)$ alors $-z^{-1}(A - z_0)R(z^{-1} + z_0)$ est un inverse borné de $R(z_0) - z$, d'où $z \notin \sigma(R(z_0))$.

La fonction $z \mapsto z^{-1} + z_0$ est bi-continue donc envoie une partie isolé sur une partie isolé. Soit $z_1 \in \sigma_{disc}(R(z_0))$, d'après le lemme précédant, $z \mapsto (R(z_0) - z)^{-1}$ est méromorphe, ses résidus sont des opérateurs de rang finis, donc c'est le cas également de $z \mapsto (A - (z^{-1} + z_0))^{-1}$. Pour tout w dans un voisinage de $(z^{-1} + z_0)$, $w \mapsto (R(w))$ est méromorphe et ses résidus ont un rang fini, donc $z^{-1} + z_0 \in \sigma_{disc}(A)$. De même dans l'autre sens si $w \in \sigma_{disc}(A)$ alors $z = (w - z_0)^{-1} \in \sigma_{disc}(R(z_0))$. En passant au complémentaire, on conclut pour le spectre essentiel également. \square

Lemme 4.2.3. (Spectre essentiel) : Si A et B sont des opérateurs bornés de \mathcal{H} , tel que $A - B$ est compact et :

- 1) $\sigma(A)$ est d'intérieur vide
- 2) Chaque composante connexe de $\mathbb{C} \setminus \sigma(A)$ intersecte $\rho(B)$

Alors $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$

Preuve : Posons $C = A - B$ qui est compact par hypothèse. Alors $z \mapsto C(A - z)^{-1}$ est borné donc fermé, par le lemme, c'est donc une fonction méromorphe sur $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(A)$ et ses pôles sont en $\sigma_{disc}(A)$, et ses résidus sont des opérateurs de rang fini. Soit $z \notin \sigma(A)$, $B - z \text{id}$ est inversible si et seulement si $\text{id} - C(A - z)^{-1}$ l'est également. Or par hypothèse, chaque composante de $\mathbb{C} \setminus \sigma(A)$ contient un point de $\rho(B)$, d'où $\text{id} - C(A - z)^{-1}$ inversible. Comme $\sigma_{disc}(A)$ est discret, $\mathbb{C} \setminus \sigma(A)$ et $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(A)$ ont mêmes composantes connexes. D'après le [Théorème méromorphe de Fredholm](#), $\text{id} - C(A - z)^{-1}$ est inversible sur $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(A)$ sauf sur une partie négligeable D' , où ses résidus sont des opérateurs de rang fini. Alors, $\sigma_{disc}(B) \subset \mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(A)$, et donc $\sigma_{ess}(B) \subset \sigma_{ess}(A)$. Or, par hypothèse, $\sigma(A)$ est d'intérieur vide, chaque composante connexe de $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(B)$ n'intersecte ni $\sigma(A)$, ni $\sigma(B)$. On peut donc refaire le même argument en inversant A et B , et on en déduit $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$. \square

Lemme 4.2.4. Soit A et B des opérateurs fermés de \mathcal{H} , tels que $(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1}$ est compact pour un certain $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$. Alors $(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1}$ est compact pour tout $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$.

Preuve : Si $z_0 \in \rho(A) \cap \rho(B)$, pour tout $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$ on peut écrire par la formule des résolvantes $(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1} = C[(A - z_0)^{-1} - (B - z_0)^{-1}]D$ avec C et D opérateurs bornés. Par le lemme Fermeture des compacts,

l'espace des opérateurs compacts est un sous espace vectoriel stable par multiplication par un opérateur borné, donc $(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1}$ est compact. \square

Corollaire 4.2.1. (Critère de Weyl) : Soit A et B deux opérateurs auto-adjoints tels que $(A + i)^{-1} - (B + i)^{-1}$ soit compact, alors $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$.

Preuve : B étant auto-adjoint, on a $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \subset \rho(B)$. Par le [lemme précédent](#), comme $(A + i)^{-1} - (B + i)^{-1}$ est compact, c'est vrai en remplaçant i par $z \in \mathbb{C}$, et on applique le [Théorème de Weyl](#). \square

Preuve du théorème de Weyl : Par hypothèse, on peut choisir $z_0 \in \rho(B) \cap \rho(A)$, dont la partie imaginaire est non nulle. On pose $D = (A - z_0)^{-1}$ et $E = (B - z_0)^{-1}$. D'après [Spectre de la résolvante](#), il suffit de montrer que $\sigma_{ess}(D) = \sigma_{ess}(E)$. A étant auto-adjoint, par [Spectre autoadjoint](#), $\sigma_{ess}(A) \subset \mathbb{R}$, alors $\sigma_{ess}(D) \subset \{\lambda \mid \frac{1}{\lambda} + z_0 \in \mathbb{R}\} \cup \{0\}$. En particulier, $\sigma_{ess}(D)$ est d'intérieur vide, et soit $\sigma_{ess}(A) = \mathbb{R}$, dans ce cas $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(D)$ a deux composantes connexes, ou bien $\sigma_{ess}(A) \neq \mathbb{R}$ et dans ce cas $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(D)$ est connexe. Dans les deux cas, l'hypothèse (2) et le [lemme Spectre de la résolvante](#) implique que $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(D)$ intersecte $\rho(E)$.

Or D et E sont des opérateurs bornés, et $D - E$ est compact d'après le [lemme précédent](#). On peut donc appliquer le [lemme Spectre essentiel](#), $\sigma_{ess}(E) = \sigma_{ess}(D)$, ce qui conclut. \square

4.2.2 Application à l'opérateur de Schrödinger

Théorème 4.2.2. (Spectre essentiel de Schrödinger) : Soit $2 \leq d \leq 3$. On considère l'opérateur de Schrödinger $H = -\Delta + V$ avec $V : x \mapsto \frac{1}{|x|}$ sur le domaine $H^2(\mathbb{R}^d)$ de $L^2(\mathbb{R}^d) = \mathcal{H}$. Alors $\sigma_{ess}(H) = \mathbb{R}_+$.

Preuve : On pose $H = -\Delta + V$ et $H_0 = -\Delta$, qui sont tous deux autoadjoints d'après [Autoadjoint \$-\Delta\$](#) et [Opérateur de Schrödinger autoadjoint](#). On veut montrer que l'opérateur suivant est compact :

$$\begin{aligned} (H + i)^{-1} - (H_0 + i)^{-1} &= (H + i)^{-1}(H_0 - H)(H_0 + i)^{-1} \\ &= (H + i)^{-1}V(H_0 + i)^{-1} \end{aligned}$$

Comme $(H + i)^{-1}$ est borné, par le [lemme Fermeture des compacts](#), il suffit de vérifier que $V(H_0 + i)^{-1}$ est compact pour appliquer le [critère de Weyl](#).

Soit $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ dont le support est dans $B(0, 1)$ et $\chi \leq 1$, on pose pour $n > 0$

$$\begin{aligned} V(x) &= \underbrace{\chi\left(\frac{x}{n}\right)V(x)}_{:= V_n(x)} + (1 - \chi\left(\frac{x}{n}\right))V(x) \\ \text{alors } V_n(x) &\leq \frac{1}{n} \end{aligned}$$

Alors on a la convergence en norme d'opérateur :

$$\begin{aligned} \|V - V_n\| &\xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \\ \text{et } \|V(H_0 + i)^{-1} - V_n(H_0 + i)^{-1}\| &\leq \|V - V_n\| \underbrace{\|(H_0 + i)^{-1}\|}_{< +\infty} \end{aligned}$$

Donc il suffit de vérifier que $V_n(H_0 + i)^{-1}$ est compact pour chaque $n > 0$.

$$\begin{aligned} (V_n(H_0 + i)^{-1}f)(x) &= V_n \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(((H_0 + i)^{-1}f)))(x) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} V_n \frac{1}{i + |\xi|^2} e^{i\langle \xi, x-y \rangle} d\xi}_{:= K(x,y)} f(y) dy \end{aligned}$$

Montrons que $K \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$:

$$\begin{aligned}
 \|K\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}^2 &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} |K(x, y)|^2 dx dy \\
 &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left| \int_{\mathbb{R}^d} V_n(x) \underbrace{\frac{1}{i + |\xi|^2}}_{:=g(\xi)} e^{i\langle \xi, x-y \rangle} d\xi \right|^2 dx dy \quad \text{Comme } d \leq 3, g \in L^2(\mathbb{R}^d) \\
 &\leq \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} |\mathcal{F}^{-1}(g)(x-y)|^2 dx dy \\
 &= \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} |\mathcal{F}^{-1}(g)(y)|^2 dx dy \quad (\text{Changement de variable à } x \text{ fixé}) \\
 &= \frac{1}{n^2} \|\mathcal{F}^{-1}g\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = \frac{1}{n^2} \|g\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 < +\infty
 \end{aligned}$$

Donc, d'après le lemme [Opérateur à noyau](#), $V_n(H_0 + i)^{-1}$ est un opérateur de Hilbert-Schmidt, par le lemme [Hilbert-Schmidt compact](#), il est compact. Mais alors $V(H_0 + i)^{-1}$ est une limite d'opérateur compact, donc par le lemme [Fermeture des compacts](#), est compact. D'après le [Critère de Weyl](#), $\sigma_{ess}(H) = \sigma_{ess}(H_0) = \sigma_{ess}(-\Delta) = \mathbb{R}_+$, d'après le lemme [Spectre essentiel du Laplacien](#). \square

Le spectre essentiel est un peu plus compliqué à comprendre physiquement, il est particulièrement important dans la théorie de la diffraction. Pour l'atome d'hydrogène, on peut l'interpréter comme l'énergie nécessaire à un électron pour orbiter autour du noyau.

5 Espaces de Sobolev et opérateurs sur les variétés

5.1 Analyse spectrale sur le n-Tore

On débute en définissant la notion d'espace de Sobolev sur le n-Tore. La raison est que c'est une variété sur laquelle on a une notion de transformée de Fourier, et que par la suite, les propriétés des variétés compacts pourront être vérifiées localement en envoyant chaque carte locale dans un tore assez grand.

Définition 5.1.1. (Espace de Sobolev) : Soit $n \in \mathbb{N}^*$, et $s \in \mathbb{R}$. On définit :

$$\begin{aligned}
 \forall u \in \mathcal{D}'(\mathbb{T}^n) \quad \Lambda^s u &= \sum_{m \in \mathbb{Z}^n} \langle m \rangle^s \hat{u}(m) e^{im\theta} \\
 H^s(\mathbb{T}^n) &= \Lambda^{-s} L^2(\mathbb{T}^n) \\
 \text{muni de la norme} \quad \|u\|_s^2 &= \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} |\hat{u}(k)|^2 \langle k \rangle^{2s}
 \end{aligned}$$

et $\langle k \rangle = \sqrt{1 + k^2}$.

Lemme 5.1.1. (Injection compact) : Soit $n \in \mathbb{N}^*$, pour tout $0 < r < s$ les injections suivantes sont compactes :

$$H^s(\mathbb{T}^n) \hookrightarrow H^{(s-r)}(\mathbb{T}^n) \hookrightarrow L^2(\mathbb{T}^n) \hookrightarrow H^{-(s-r)}(\mathbb{T}^n) \hookrightarrow H^{-s}(\mathbb{T}^n)$$

Noté que cette définition est analogue à celle des espaces H^k avec la transformée de Fourier. \mathbb{R}^n et le n-Tore sont les deux espaces où on sait définir une transformée de Fourier, ce qui permet de rendre le lemme suivant facile.

Preuve : Comme on a $H^\sigma = \Lambda^{-\sigma} L^2$ Cela revient à montrer que

$$\Lambda^{-\sigma} : H^s \rightarrow H^s$$

est compact pour $\sigma > 0$. On peut l'approcher par $\Lambda_N^{-\sigma} u = \sum_{|m| \leq N} \langle m \rangle^{-\sigma} \hat{u}(m) e^{im\theta}$ qui est un opérateur à rang fini. On obtient l'estimation $|\Lambda_N^{-\sigma} - \Lambda^{-\sigma}| \leq \langle \sigma \rangle^{-N}$, $\Lambda^{-\sigma}$ est alors limite en norme d'opérateurs compacts, qui d'après le lemme [Fermeture des compacts](#), est compact. \square

5.2 Variété Riemannienne

Comme souvent en physique, la bonne façon de faire est d'utiliser la géométrie différentielle, et la notion de variété, afin de travailler sur des espaces qui ressemblent plus à une sphère -ou à un atome d'hydrogène- que simplement l'espace \mathbb{R}^d . Le fait de démontrer les résultats dans \mathbb{R}^d permet ensuite de les transporter (lorsque ce sont des notions topologiques) à la variété via des cartes locales. On a cependant besoin d'un peu plus de structure sur notre variété.

5.2.1 Métrique Riemannienne

Pour copier l'idée des espaces de Sobolev sur une variété, on va avoir besoin d'une notion de produit scalaire sur la variété. La métrique de Riemann donne exactement le bon cadre pour cela. On donne dans cette partie, des propriétés et définitions de base des variétés riemanniennes.

Définition 5.2.1. (Variété riemannienne) : Une *variété riemannienne* est la donnée (M, g) où $M \subset \mathbb{R}^d$ est une variété différentielle et g est une famille de forme bilinéaire symétrique définie positive (produit scalaire) $(g_x)_{x \in M}$, sur chaque plan tangent $T_x M$ pour $x \in M$.

$$\forall x \in M \quad (T_x M, g_x) \text{ est un espace euclidien}$$

tel que, pour toute carte (φ, U) les fonctions $g_{ij} : \varphi(U) \mapsto \mathbb{R}$ définies par $x \mapsto g_{ij}(x) := g_x(\frac{\partial}{\partial x^i}, \frac{\partial}{\partial x^j})$ sont différentiables, où $(\frac{\partial}{\partial x^i})_i$ est une base de $T_x M$, et $(x^i)_i$ coordonnée locale de U . Si u, v ont des coordonnées locales sur $U : (u_1, \dots, u_n), (v_1, \dots, v_n)$, alors on a :

$$g_x(u, v) = \sum_{i,j=1}^n g_{i,j}(x) u_i v_j$$

$(g_{i,j}(x))_{i,j}$ est une matrice symétrique inversible, dont les coefficients sont des fonctions différentiables. En notant que $dx_i(u) \otimes dx_j(v) = u_i v_j$, on a que

$$g_x = \sum_{i,j=1}^n g_{i,j}(x) dx_i \otimes dx_j$$

g est appelé champ de tenseur métrique sur M , ou juste métrique. On notera $|g| := \det(g_{ij})$ le déterminant de la matrice associée. On dit de plus que (M, g) est une variété riemannienne compacte si la variété différentielle M est compacte.

Comme tout objet en géométrie différentielle, on a une notion de "tiré en arrière", afin de construire de nouvelles structures en partant de celle déjà construite. De notre côté, on va en avoir besoin pour une question technique.

Définition 5.2.2. (Métrique "pull back") : Soit (N, g) une variété riemannienne et M une variété différentiable, et $f \in C^\infty(M, N)$, une immersion. On définit la métrique tirée de g par f :

$$f^* g_x(u, v) = g_{f(x)}(df_x(u), df_x(v)) \quad \forall x \in M \quad \forall u, v \in T_x M$$

qui définit bien une métrique riemannienne sur M

Preuve : Le fait que ce soit une forme bilinéaire symétrique est immédiate par définition de g . Si $u \in T_x M$ tel que $u \neq 0$, alors $df_x(u) \neq 0$ car f est une immersion, et donc $f^*g_x(u, v) > 0$ car g est définie positive. Les fonctions $(f^*g_x)_{ij}$ sont donnés par $g_{f(x)}(\partial_i f(x), \partial_j f(x))$, qui sont différentiables car f est différentiable et g également. \square

Le lemme suivant sera utile pour montrer l'indépendance du choix du système de coordonnées dans une carte locale.

Lemme 5.2.1. (Changement de coordonnées de la métrique) : Soit (M, g) variété riemannienne compacte de dimension $n \geq 1$. Soit U un ouvert de \mathbb{R}^n et φ_1, φ_2 fonction tel que $(\varphi_1, U), (\varphi_2, U)$ soient deux cartes locales de M . On pose $f = \varphi_1^{-1} \circ \varphi_2$. Si g_{ij} est définie localement dans U par les coordonnées $\varphi_1 : (y^1, \dots, y^n)$, alors on définit la composante de la métrique g_{ij} dans les coordonnées $\varphi_2 : (x^1, \dots, x^n)$ par :

$$\tilde{g}_{ij} := (f^*g)_{ij}$$

Et on a l'identité :

$$\tilde{g}_{ij}(x) = g_{kl}(y) \frac{\partial}{\partial x^i} y^k \frac{\partial}{\partial x^j} y^l$$

où si $x \in M$, $y^k = f^k(x^1, \dots, x^n)$, c'est à dire (x^1, \dots, x^n) sont les coordonnées locales données par φ_1 et (y^1, \dots, y^n) , celles données par φ_2 sur U .

Preuve : Soit $x \in M$, $y = f(x)$.

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{ij}(x) &= (f^*g)_x \left(\frac{\partial}{\partial x^i}, \frac{\partial}{\partial x^j} \right) \\ &= g_{f(x)} \left(df_x \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \right), df_x \left(\frac{\partial}{\partial x^j} \right) \right) \\ &= g_y \left(\frac{\partial}{\partial x^i} f^k(x) \frac{\partial}{\partial y^k}, \frac{\partial}{\partial x^j} f^l(x) \frac{\partial}{\partial y^l} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x^i} f^k(x) \frac{\partial}{\partial x^j} f^l(x) g_y \left(\frac{\partial}{\partial y^k}, \frac{\partial}{\partial y^l} \right) = g_{kl}(y) \frac{\partial}{\partial x^i} y^k \frac{\partial}{\partial x^j} y^l \end{aligned}$$

\square

5.2.2 Intégration sur une variété riemannienne compacte

Maintenant qu'on a une définition de métrique sur notre variété, on va l'utiliser pour définir l'intégration. On va introduire une forme de volume dépendante de la métrique, et intégrer contre cette dernière. De façon pratique, l'intégrale sera faite en passant par des cartes. Un des problèmes étant de savoir si une fonction a toujours son support inclus dans une carte. Grâce à la compacité, à l'aide d'une partition de l'unité, on pourra toujours se ramener au cas d'une seule carte.

Définition 5.2.3. (Espace L^2/H^2) : Soit M une variété riemannienne compacte. On dit qu'une fonction $u : M \rightarrow \mathbb{R}$ est dans $L^k(M)$ (respectivement $H^k(M)$) si pour toute carte $(\varphi_i; U_i)$, $u \circ \varphi_i \in L^k(U_i, dV)$ (respectivement $\in H^k(U_i, dV)$), où $dV = \sqrt{|g|} dy_1 \dots dy_n := \sqrt{|g|} dy$. Si le support de u est entièrement contenu dans une carte locale (φ, U) on définit en coordonnée locale (y_1, \dots, y_n) :

$$\int_M u \, dV := \int_U u \circ \varphi \, dV = \int_U u \circ \varphi(y) \sqrt{|g(y)|} \, dy$$

De plus cette définition ne dépend pas du système de coordonnées locales sur U .

Preuve : Si φ' est un autre système de coordonnées sur U , donné par (x_1, \dots, x_n) , alors d'après la formule de changement de coordonnées, on a, si $x \in M$, et $f = \varphi^{-1} \circ \varphi'$

$$\det(\tilde{g}_{ij}(x)) = \det(g_{ij}(x)) \det\left(\frac{\partial}{\partial x^j} y^i\right)^2$$

On applique ensuite la formule de changement de variables :

$$\begin{aligned} \int_U u \circ \varphi'(x) \sqrt{\det(\tilde{g}_{ij}(x))} dx &= \int_U u \circ \varphi'(x) \left| \det \frac{\partial}{\partial x^j} y^i \right| \sqrt{\det(g_{ij}(y))} dx \\ &= \int_U u \circ \varphi(y) \sqrt{\det(g_{ij}(y))} dy \quad (\text{Formule changement de variables avec } f^{-1}) \end{aligned}$$

Ainsi l'intégrale ne dépend pas du système de coordonnées de la carte. \square

Pour définir l'intégrale de $u \in L^1(M)$ de façon générale, on utilise que M est compacte, on peut donc trouver un atlas $(\varphi_i, U_i)_{i \in I}$ fini. On choisit une partition de l'unité (Θ_i) subordonnée à $(\varphi_i(U_i))$ et on pose :

$$\int_M u dV := \sum_{i \in I} \int_{\varphi_i(U_i)} u \Theta_i dV$$

Il suffira alors de faire les preuves pour les fonctions $u : M \rightarrow \mathbb{R}$ ayant un support inclus dans une unique carte $V \subset M$, et la valeur de l'intégrale ne dépendra pas du choix du système de coordonnées φ_i pour la carte locale (φ_i, U) .

Lemme 5.2.2. (Complétude) : Soit (M, g) une variété riemannienne compacte, $L^2(M)$ est un espace de Hilbert pour le produit scalaire :

$$\forall u, v \in L^2(M) \quad \langle u, v \rangle_{L^2(M)} := \int_M uv dV$$

M étant compact, si les ouverts U_i sont supposés bornés, on a donc les inclusions $L^p(M) \subset L^q(M)$ si $q \leq p < \infty$, de plus $H^k(M)$ est dense dans $L^2(M)$ pour tout $k \in \mathbb{N}$

Preuve : La preuve que c'est bien un produit scalaire est immédiate en notant que dans la définition, g est définie positive. On peut supposer sans perte de généralité que le support d'une fonction $L^2(M)$ est inclus dans un unique ouvert V . Il suffit ensuite pour prouver que l'espace est complet, d'envoyer une suite de Cauchy dans $L^2(\varphi(U))$, d'en déduire l'existence d'une limite, car $L^2(U)$ est complet, et de la renvoyer en arrière par φ^{-1} . L'indépendance du système de coordonnées fait que cette limite ne dépend pas du choix de la carte locale (φ_1, U) , (φ_2, U) pour $V \subset M$. La densité se prouve de la même façon. \square

5.3 Opérateur de Laplace-Beltrami

Introduisons maintenant un opérateur analogue au Laplacien, mais qui prend en compte la métrique de la variété. Cet opérateur, qu'on notera aussi $-\Delta$ est appelé opérateur de Laplace-Beltrami, et ses propriétés nous donneront des informations cruciales pour déduire des propriétés quantiques de l'atome d'hydrogène.

Il y a deux manières de le définir, soit par des cartes, soit globalement en utilisant des notions de géométrie différentielle poussée. La seconde définition va nous permettre de montrer les propriétés géométriques de l'opérateur (autoadjoint, positif). Quand à la première, cela nous permet de connaître la forme précise de l'opérateur lorsqu'on regarde localement, ce qu'on utilisera dans le cas de l'atome d'hydrogène, assimilable à la boule de rayon r .

5.3.1 Fonctions propres de Laplace-Beltrami

Définition 5.3.1. (Dérivées locales) : Soit $u \in H^k(M)$ et (φ, U) de M une carte locale. On a alors $u \circ \varphi \in H^k(U)$, on définit les dérivées locales partielles de u comme les fonctions de U dans \mathbb{R} :

$$\partial_\alpha^{|\alpha|} u := \partial_\alpha^{|\alpha|} u \circ \varphi \in L^k(U)$$

Afin de définir l'opérateur de Laplace-Beltrami de façon globale (on donnera sa forme locale ensuite) on a besoin d'introduire un concept de géométrie différentielle, la **dérivée de Lie** le long d'un champ de vecteur.

Cette définition fonctionne pour n'importe quel variété différentiel M , cependant la preuve ne sera pas faite ici.

Théorème 5.3.1. (Dérivée de Lie [ADMIS]) : On note ΩM l'espace des formes différentielles sur M et X un champ de vecteurs. Il existe une unique application linéaire $\mathcal{L}_X : \Omega M \rightarrow \Omega M$ vérifiant :

- (1) Pour tout f différentiable sur M à valeurs réelles, $\mathcal{L}_X(f) = df(X)$
- (2) Pour toutes formes différentielles α, β , $\mathcal{L}_X(\alpha \wedge \beta) = \mathcal{L}_X(\alpha) \wedge \beta + \alpha \wedge \mathcal{L}_X(\beta)$
- (3) \mathcal{L}_X et d , la dérivée extérieure, commutent

\mathcal{L}_X est appelée la **dérivée de Lie** le long de X .

Définition 5.3.2. (Gradient/Divergence/Opérateur de Laplace Beltrami global) : Soit $u \in H^2(M)$, on définit le gradient de u en $x \in M$, $\nabla u(x)$, comme l'unique vecteur tangent à x tel que :

$$\forall v \in T_x M \quad g_x(\nabla u(x), v) = du(x)(v)$$

Où du est la 1-forme différentielle donnée par la dérivée extérieure de u . La i -ème coordonnée locale de ∇u est :

$$(\nabla u)^i = \partial^i u := \sum_j g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j} u$$

Où g^{ij} est l'inverse du tenseur métrique, c'est à dire :

$$\sum_k g_{ik}(x)g^{kj} = \delta_{i,j} \quad \text{où } \delta_{i,j} \text{ est le symbole de Kronecker}$$

On peut supposer la variété orientée (l'opérateur ne dépendra pas de l'orientation à la fin), ce qui permet de spécifier une forme de volume qu'on note $dV = \sqrt{|g|} dx^1 \wedge \dots \wedge dx^n$, où les dx^i sont les 1-formes associés aux vecteurs $\frac{\partial}{\partial x^i}$ et \wedge est le produit extérieur. On définit la divergence d'un champ de vecteurs X par l'unique fonction vérifiant :

$$\mathcal{L}_X(\omega) = (\operatorname{div} X)\omega$$

Où ω est une forme de volume quelconque. On a en effet que l'espace des formes de volume est une droite vectorielle, d'où la divergence ne dépend pas de la forme de volume, et donc de l'orientation. En coordonnée locale on a :

$$\operatorname{div} X = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \sum_i \partial_i (\sqrt{|g|} X^i)$$

Enfin, on définit l'opérateur de Laplace-Beltrami par :

$$-\Delta u = -\operatorname{div} \nabla u$$

Si on écrit l'opérateur de Laplace-Beltrami en coordonnées locales, on retrouve bien la définition locale de l'opérateur.

Lemme 5.3.1. (Opérateur de Laplace-Beltrami local) : Soit $u \in H^2(M)$, on se donne une carte locale (φ, U) de M , et on définit localement l'opérateur de Laplace-Beltrami :

$$-\Delta u := -\frac{1}{\sqrt{|g|}} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \partial_i (g^{ij} \sqrt{|g|} \partial_j u)$$

On passe ensuite à la structure d'espace de Hilbert des espaces de Sobolev.

Lemme 5.3.2. (Sobolev sur M) : $H^1(M)$ est une espace de Hilbert pour le produit scalaire :

$$\forall u, v \in H^1(M) \quad \langle u, v \rangle_{L^2(M)} + \int_M g_x(\nabla u(x), \nabla v(x)) \, dV$$

Ce lemme se prouve de la même manière que celui sur $L^2(M)$, les seules choses considérées sont des propriétés topologiques qui sont préservées par le changement de carte. \square

Lemme 5.3.3. (Laplace-Beltrami Autoadjoind) : Soit (M, g) une variété riemannienne compacte sans bord. L'opérateur de Laplace-Beltrami $-\Delta$ est positif et auto-adjoind sur le domaine dense $H^2(M)$.

Preuve : Soient f_1, f_2 , fonctions 2 fois différentiables sur M (qui est automatiquement à support compact) et X un champ de vecteur. On remarque qu'on a l'égalité suivante :

$$\operatorname{div} fX = f \operatorname{div} X + df(X) = f \operatorname{div} X + g(X, \nabla f)$$

On applique pour $X = \nabla f_2$, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_M f_1(\operatorname{div} \nabla f_2) + g(\nabla f_1, \nabla f_2) \, dV &= \int_M \operatorname{div}(f_1 \nabla f_2) \, dV \\ &= 0 \end{aligned}$$

d'après le théorème de Stokes. $f_1 \nabla f_2$ est, en effet, à support compact car M est compacte.

On obtient alors :

$$\begin{aligned} \int_M f_1(-\Delta f_2) \, dV &= \int_M g(\nabla f_1, \nabla f_2) \, dV \\ &= \int_M (-\Delta f_1) f_2 \, dV \quad (\text{Par symétrie de } g) \end{aligned}$$

On montre ensuite que $\operatorname{Im}(-\Delta + \operatorname{id}) = L^2(M)$. Cela revient à résoudre l'équation aux dérivées partielles :

$$\Delta u - u = f \in L^2(M)$$

avec $u \in H^2(M)$, on peut supposer que M est sans bord, (ce qui sera le cas de la sphère, cas qui nous intéresse), alors $H_0^1(M) = H^1(M)$. On considère alors l'application, qui à $f \in H^1(M)$ associe :

$$\|\nabla f\|^2 := \int_M g(\nabla f, \nabla f) \, dV$$

En utilisant l'inégalité de Poincaré (qui est vrai uniquement dans H_0^1) :

$$\exists C > 0 \quad \forall f \in H_0^1(M) \quad \|f\| \leq C \|\nabla f\|$$

Ce qui nous donne que $\|\nabla\|$ est une norme sur $H_0^1(M)$ équivalente à la norme sur $H^1(M)$. $H_0^1(M)$ est donc un espace de Hilbert pour cette norme, et d'après le [théorème de Lax-Milgram](#), l'EDP possède une unique solution dans $H^2(M) \cap H_0^1(M) = H^2(M)$. Donc, par [Second critère](#), $-\Delta$ est autoadjoint.

De plus, si $f \in H^2(M)$,

$$\int_M f(-\Delta f) \, dV = \int_M g(\nabla f, \nabla f) \, dV \geq 0$$

Car g est une forme bilinéaire positive, donc $-\Delta$ est positif. \square

Définition 5.3.3. (Dual de Sobolev) : Si M est une variété riemannienne et $n \in \mathbb{N}$, on note $H^{-n}(M)$ le dual de l'espace de $H_0^n(M) = H^n(M)$ dans le cas d'une variété M sans bord.

Lemme 5.3.4. (Injection compacte) : Soit $n \in \mathbb{N}^*$, pour tout $0 < r < s$ les injections suivantes sont compactes :

$$H^s(M) \hookrightarrow H^{(s-r)}(M) \hookrightarrow L^2(M) \hookrightarrow H^{-(s-r)}(M) \hookrightarrow H^{-s}(M)$$

Preuve : On donnera simplement une indication de comment faire, car cela demande d'écrire beaucoup, et que ce n'est pas le centre de ce mémoire. On utilise un nombre fini de carte pour pouvoir plonger chaque domaine de définition dans un tore assez grand, et en déduire le lemme par [la même version sur le n-tore](#).

Lemme 5.3.5. (Laplace Beltrami perturbé) : L'opérateur $-\Delta + \text{id} : H^1(M) \longrightarrow H^{-1}(M)$ est bijectif. Son inverse, noté $T : H^{-1}(M) \longrightarrow H^1(M)$ se restreint par $T' : L^2(M) \longrightarrow L^2(M)$, qui est un opérateur compact et autoadjoint.

Preuve : Commençons par l'injectivité. Soit $u \in H^1(M)$ tel que $-\Delta u + u = 0$, cette égalité est sous entendue en formulation faible, c'est à dire :

$$\forall \varphi \in C_c^\infty(M) \\ \int_M g_x(\nabla u(x), \nabla \varphi(x)) + u(x)\varphi(x) \, dV = 0$$

Toujours par le [théorème de Lax-Milgram](#), on a une unique solution à cette EDP qui est $u = 0$. D'où l'injectivité.

Pour la surjectivité, si on prend une forme linéaire L continue sur $H^1(M)$ qui est un espace de Hilbert d'après [Sobolev sur M](#), d'après le [théorème de Riesz](#), il existe un unique $u \in H^1(M)$ tel que pour tout $v \in H^1(M)$, $Lu = \langle u, v \rangle_{L^2(M)} + \int_M g(\nabla u, \nabla v) \, dV$ (argument déjà utilisé si on développe la preuve de l'injectivité on résolvant l'équation). Cette dernière équation est exactement la formulation faible de $-\Delta u + u = L$ (avec une égalité au sens des distributions).

On utilise alors le lemme [injection compact](#), on a :

$$(-\Delta + \text{id})^{-1} : L^2(M) \longrightarrow H^2(M) \hookrightarrow L^2(M)$$

est compact comme composition d'opérateur compact. Il faut voir que $(-\Delta + \text{Id})^{-1}$ est autoadjoint, or il est borné et symétrique, donc autoadjoint, de plus c'est une composé d'un opérateur compact (la restriction) et d'un opérateur borné (car $(-\Delta + \text{id})^{-1}$ est borné par hypothèse), donc est compact. \square

Lemme 5.3.6. (Base propre de Laplace-Beltrami) : Il existe une base orthonormée $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de $L^2(M)$ formée des vecteurs propres de $-\Delta$ telle que :

$$(1) \quad -\Delta u_n = \lambda_n u_n \quad \forall n \in \mathbb{N} \\ (2) \quad \lambda_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$$

Preuve : D'après le [lemme précédent](#) l'opérateur $T' : L^2(M) \rightarrow L^2(M)$ est compact et autoadjoint. D'après le [Théorème spectral](#), il existe une base orthonormée (hilbertienne) de $L^2(M)$, notée $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$, et une suite $(\mu_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de valeurs propres de T' , qui vérifient :

$$\begin{aligned} Tu_n &= \mu_n u_n \\ \mu_n &\xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \end{aligned}$$

Alors $(-\Delta + \text{id})^{-1}u_n = \mu_n u_n$, donc $-\Delta u_n \mu_n + u_n \mu_n = u_n$, comme l'opérateur est inversible, aucune des valeurs propres n'est nul et ainsi :

$$-\Delta u_n = \underbrace{\frac{1 - \mu_n}{\mu_n}}_{:= \lambda_n} u_n$$

De plus, $\mu_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$, donc $\lambda_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$. □

5.3.2 Etude des valeurs propres de Laplace-Beltrami dans le cas $M = \mathbb{S}^2$

Dans cette section on fixe $M = \mathbb{S}^2$, et on considère l'espace propre E_λ associé à la valeur propre discrète $\lambda \in \sigma_{disc}(-\Delta)$ de $-\Delta$ sur \mathbb{S}^2 , noté $-\Delta_S$. Le but est de démontrer une propriété sur les valeurs propres de l'opérateur de Laplace-Beltrami dans ce cadre. Cette propriété nous donnera l'existence d'un nombre entier qui caractérisera les solutions de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène.

Pour ceci, on a besoin d'introduire quelques nouveaux opérateurs. Cependant, les preuves dans cette partie sont beaucoup plus algébriques que précédemment. C'est une des richesses du sujet. On peut facilement trouver un point de vue dans un autre champ des mathématiques qui permette de répondre sans trop de difficulté à une question.

Définition 5.3.4. (Opérateur de rotation élémentaire) : On définit sur $H^2(\mathbb{S}^2)$ les 3 opérateurs suivants :

$$\begin{aligned} L_x &= y\partial_z - z\partial_y \\ L_y &= z\partial_x - x\partial_z \\ L_z &= x\partial_y - y\partial_x \end{aligned}$$

On définit de plus les opérateurs :

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

appelé "opérateur de création" et "d'annihilation", ce nom vient d'une propriété qui est énoncé dans le lemme suivant. On définit également :

$$J_\bullet = -iL_\bullet$$

Remarque. Notons que l'opérateur de Laplace-Beltrami sur la sphère \mathbb{S}^2 est donné par :

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

Lemme 5.3.7. (Propriété élémentaire) : On a les propriétés suivantes :

$$L_x L_y - L_y L_x = L_z$$

$$L_y L_z - L_z L_y = L_x$$

$$L_z L_x - L_x L_z = L_y$$

Si $\psi \in H^2(\mathbb{S}^2)$ tel que $J_z \psi = j_z \psi$:

$$J_z(L_+ \psi) = (j_z + 1)(L_+ \psi) \quad (\text{Propriété de création})$$

$$J_z(L_- \psi) = (j_z - 1)(L_- \psi) \quad (\text{Propriété d'annihilation})$$

De plus, $(J_+)^* = J_-$, les deux sont nilpotents et :

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

Preuve : Pour le premier point, on va faire juste une des 3 égalités. Les opérateurs ∂_i commutent deux à deux par le lemme de Schwartz.

$$\begin{aligned} L_x L_y - L_y L_x &= (y\partial_z - z\partial_y)(z\partial_x - x\partial_z) - (z\partial_x - x\partial_z)(y\partial_z - z\partial_y) \\ &= [y(\partial_x + z\partial_z\partial_x) - yx\partial_z^2 - z^2\partial_y\partial_x + zx\partial_y\partial_z] - [zy\partial_x\partial_z - z^2\partial_x\partial_y - yx\partial_z^2 - x(\partial_y - z\partial_z\partial_y)] \\ &= y\partial_x - x\partial_y = L_z \end{aligned}$$

Soit ψ tel que $J_z \psi = j_z \psi$, on peut remarquer que :

$$\begin{aligned} L_z L_+ - L_+ L_z &= iL_+ \\ \iff -iL_z L_+ - L_+(-i)L_z &= L_+ \\ \iff J_z L_+ - L_+ J_z &= L_+ \end{aligned}$$

Ce qui nous donne immédiatement que :

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

Et de même pour L_- . Si λ est une valeur propre discrète de $-\Delta_S$, E_λ est de dimension finie, (par hypothèse, les valeurs propres réelles sont supposés dans $\sigma_{disc}(-\Delta_S)$) donc J_z est diagonalisable sur E_λ . Si $J_z v = mv$, $J_+ v$ est un vecteur propre de J_z pour la valeur propre $m + 1$. Comme on a un nombre fini de valeurs propres, J_+ est donc nilpotent. Des intégrations par parties montrent que J_+ et J_- sont adjoints, donc les deux sont nilpotents. On a immédiatement :

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= J_+ J_- - J_- J_+ = L_- L_+ - L_+ L_- = -[L_+, L_-] \\ &= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) - (L_x - iL_y)(L_x + iL_y) \\ &= -i(L_x L_y - L_y L_x) + i(L_y L_x - L_x L_y) = -[L_+, L_-] = -i[L_x, L_y] + i[L_y, L_x] \\ &= -2iL_x L_y + 2iL_y L_x = 2J_z \end{aligned}$$

□

Théorème 5.3.2. (Valeurs propres de Laplace-Beltrami) : Les valeurs propres $\lambda \in \sigma_{disc}$ de $-\Delta_S$ (le laplacien sphérique) s'écrivent :

$$\lambda = l(l + 1)$$

Où $l \in \mathbb{N}$ est un entier naturel.

Preuve : On note que $-\Delta_S = J_z^2 + J_x^2 + J_y^2$, comme on a $[J_x, J_y] = iJ_z$ par [Propriété élémentaire](#) et de même pour les autres, on obtient que $[-\Delta_S, J_i] = 0$ pour $i = x; y; z$. Commençons par montrer les formules suivantes :

$$\begin{aligned} -\Delta_S &= J_+ J_- + J_z^2 - J_z \\ &= J_- J_+ + J_z^2 + J_z \end{aligned}$$

En effet :

$$\begin{aligned} J_+ J_- &= -L_x^2 - \underbrace{-i[L_x, L_y]}_{= J_z} - L_y^2 \\ J_- J_+ &= J_+ J_- - 2J_z \end{aligned}$$

On prend un vecteur propre commun v , alors si m est une valeur propre de J_z pour le vecteur propre v , (qu'on peut supposer normalisé) :

$$\begin{aligned} -\Delta_S v &= (J_+ J_- + m^2 - m)v = \lambda v \\ &= (J_- J_+ + m^2 + m)v \end{aligned}$$

On considère la forme linéaire $x \mapsto \langle x, v \rangle$ qu'on note V^* , en l'appliquant à la dernière égalité on obtient :

$$\begin{aligned} \lambda &= v^* J_+ J_- v + m^2 - m \\ &= v^* J_- J_+ v + m^2 + m \\ v^* J_+ J_- v &= (\lambda + m^2 - m) \\ v^* J_- J_+ v &= (\lambda - m^2 - m) \end{aligned}$$

Or J_+ et J_- sont adjoints l'un de l'autre par le [lemme précédent](#), donc la forme bilinéaire associée à $J_+ J_-$ est positif :

$$\begin{aligned} (\lambda + m^2 - m) &\geq 0 \\ (\lambda - m^2 - m) &\geq 0 \end{aligned}$$

Ce qui implique qu'il existe une valeur maximale et minimale $A \geq 0$ et $B \leq 0$ associées à des vecteurs propres v_A, v_B . Si il existe une valeur propre supérieure à A et une inférieure à B , cela contredirait les inégalités $(\lambda + m^2 - m), (\lambda - m^2 - m) \geq 0$. On a :

$$J_+ v_A = J_- v_B = 0$$

ce qui implique :

$$\begin{aligned} \lambda - A^2 - A &= 0 \\ \lambda - B^2 + B &= \lambda - B^2 - |B| = 0 \end{aligned}$$

Donc $B = -A$, comme les valeurs propres augmentent de 1 en 1 d'après [propriété élémentaire](#), soit toute les valeurs propres sont entières, soit elles sont toutes demi-entières.

On conclut en disant que la rotation d'axe z et d'angle θ est exactement donnée par $e^{i\theta J_z}$: 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. \square

Ce nombre l possède une interprétation physique très riche. C'est d'ailleurs dans la partie suivante, en essayant de résoudre l'équation de Schrödinger "à la physicienne", qu'on tombera de nouveau sur ce nombre.

6 Equation de Schrödinger : Modèle de l'atome d'hydrogène

On a tout ce qu'il faut pour résoudre l'équation de Schrödinger. En particulier, ce qui nous intéresse, ce sont les états stationnaires, c'est à dire les solutions constantes en temps. En effet, on va supposer que les solutions générales sont sous formes séparées, et que la partie dépendante du temps s'écrit comme une exponentielle décroissante.

Par souci de simplification, on n'utilisera pas les notations de mécanique quantique "bra-ket" qui, dans notre cas, ne ferait juste qu'alourdir les notations. La densité de probabilité $|\psi\rangle$ sera donc directement notée $\psi \in H^2(M)$

Noter aussi la forme de l'équation de Schrödinger qu'on va utiliser. Elle ne possède aucune constante physique. La véritable équation est (avec la notation Bra-Ket) :

$$\partial_t |\psi\rangle = -\frac{\hbar}{2m} \Delta |\psi\rangle + V |\psi\rangle$$

Comme ajouter des constantes ne change aucunement la forme d'une équation différentielle, on va supposer afin d'avoir moins de variables que $\hbar = \sqrt{2}$ et $m = 1$.

6.1 Etats stationnaires

L'équation de Schrödinger s'écrit, si $\tilde{\psi}(x, t) \in H^2(\mathbb{R}^3) \times C^1(\mathbb{R}_+)$:

$$i\partial_t \tilde{\psi}(x, t) = H \tilde{\psi}(x, t)$$

Où H est l'opérateur de Schrödinger, muni d'un certain potentiel : $H = -\Delta + V$.

On suppose qu'une solution de l'équation s'écrit sous forme séparable : $\tilde{\psi}(x, t) = \psi(x)e^{-i\lambda t}$ pour un certain $\lambda \in \mathbb{C}$. On peut alors trouver l'équation de Schrödinger stationnaire, vérifiée par $\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$:

$$H\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

Dans notre cas de l'atome d'Hydrogène, les hypothèses physiques nous indiquent qu'on doit prendre le potentiel suivant : $V = -\frac{1}{|x|}$, ce qui donne :

$$\left(-\Delta + \frac{1}{|x|}\right)\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

Autrement dit, on cherche les valeurs propres de cette opérateur H avec pour domaine $\mathcal{D}_H = H^2(\mathbb{R}^3)$. On sait, comme H est autoadjoint, que les valeurs propres λ sont incluses dans \mathbb{R} , d'après Spectre Autoadjoint, de plus on a montré que $\sigma_{disc} \subset \mathbb{R}_-$, ces valeurs propres sont donc négatives. On les interprète comme les énergies de l'atome d'hydrogène. Cependant, on ne va pas pouvoir dire grand chose de plus en l'état. On va devoir passer en coordonnées sphériques.

On considère la métrique associée aux coordonnées sphérique, si x a pour coordonnées locales (r, θ, ϕ) :

$$g(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}$$

$$\sqrt{|g|} = r^2 |\sin \theta| = r^2 \sin \theta \quad (0 < \theta < \pi)$$

On a alors $V(x) = \frac{1}{r}$, on utilise la définition de l'opérateur de Laplace-Beltrami, ce qui donne :

$$\begin{aligned} -\Delta &= -\frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[(\partial_r \left(\frac{r^2 \sin \theta}{1} \partial_r \right) + (\partial_\theta \left(\frac{r^2 \sin \theta}{r^2} \partial_\theta \right) + (\partial_\phi \left(\frac{r^2 \sin \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\phi \right)) \right] \\ &= -\frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[(\sin \theta \partial_r (r^2 \partial_r) + (\partial_\theta \sin \theta \partial_\theta) + \left(\frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi^2 \right) \right] \\ &= -\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) - \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) - \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \\ &= -\frac{2}{r} \partial_r - \partial_r^2 - \left(\frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta \right) - \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 - \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \\ &= -(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} (\partial_\theta^2 + \underbrace{(\frac{1}{\tan \theta} \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2)}_{:= -\mathcal{L}^2 = -\Delta_S})) \end{aligned}$$

On définit également :

$$\mathcal{L}_z := -i\partial_\phi$$

Lemme 6.1.1. (Commutation) : Les opérateurs $H = -\Delta + V$, \mathcal{L}^2 et \mathcal{L}_z commutent entre eux.

Preuve : On peut remarquer que \mathcal{L}^2 ne dépend que de r , d'où $\mathcal{L}^2 \partial_r = \partial_r \mathcal{L}^2$, de plus, si f est une fonction dépendante uniquement de r , $\mathcal{L}^2 f(r) = f(r) \mathcal{L}^2$, car \mathcal{L}^2 n'a aucune dérivées selon r . Comme \mathcal{L}^2 commute avec lui-même, on en déduit immédiatement qu'il commute avec H . On peut faire le même raisonnement avec \mathcal{L}_z et H , car \mathcal{L}_z ne possède qu'une dérivée selon ϕ . Pour \mathcal{L}_z et \mathcal{L}^2 c'est la même raison, et c'est encore plus évident dans ce cas là. \square

Ce lemme montre ainsi que les 3 opérateurs ont des fonctions propres communes, c'est à dire qu'il existe des fonctions solutions du problème aux valeurs propres, dont on peut séparer chacune des variables, comme dans le lemme suivant :

Lemme 6.1.2. (Valeurs propres) : On suppose qu'une solution non triviale ψ du problème aux valeurs propres s'écrit pour $r > 0, 0 < \theta < \pi, -\frac{\pi}{2} < \phi < \frac{\pi}{2}$:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

Alors, $Y(\theta, \phi)$ est une fonction propre de l'opérateur \mathcal{L}^2 . Si de plus cette fonction est aussi séparable, $Y(\theta, \phi) = f(\theta)g(\phi)$, alors g est fonction propre de l'opérateur \mathcal{L}_z^2 .

Preuve : On suppose donc que $\psi(x, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$. La solution ψ ne peut être nulle au vu de l'équation, ce qui nous donne que $Y(\theta, \phi)$ est non nulle. En utilisant l'équation vérifiée par ψ , on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R(r)} \partial_r (r^2 \partial_r) R(r) - r^2 (V(r) - \lambda) \\ & + \frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) Y(\theta, \phi) + \frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin^2 \theta} \partial_\phi^2 Y(\theta, \phi) = 0 \end{aligned}$$

Le premier terme ne dépend que de r , et le second que des angles, la seule possibilité si la solution est non nulle, est :

$$\frac{1}{R(r)} \partial_r (r^2 \partial_r) R(r) - r^2 (V(r) - \lambda) = K \quad (16)$$

$$\frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) Y(\theta, \phi) + \frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin^2 \theta} \partial_\phi^2 Y(\theta, \phi) = -K \quad (17)$$

Cette constante K est appelé **constante de séparation**, et correspond aux valeurs propres de l'opérateur de Laplace-Beltrami sur la sphère, de domaine $H^2(S^2)$. Par le théorème [Valeur propre de Laplace-Beltrami](#), on a que $K = l(l+1)$, avec $l \in \mathbb{N}$. Les fonctions $Y(\theta, \phi)$ sont appelées **harmoniques sphériques**. La dernière égalité nous dit en particulier que $Y(\theta, \phi)$ est une fonction propre de \mathcal{L}^2 .

On suppose ensuite que $Y(\theta, \phi) = f(\theta)g(\phi)$, en faisant le même genre de jeu avec l'équation aux valeurs propres de \mathcal{L}^2 , on obtient alors l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{\sin \theta}{f(\theta)} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) f(\theta) + l(l+1) \sin^2 \theta \\ & + \frac{1}{g(\phi)} \partial_\phi^2 g(\phi) = 0 \end{aligned}$$

Encore une fois, le premier terme ne dépend que de θ et le second que de ϕ . Il existe donc une constante M tel que :

$$\frac{\sin \theta}{f(\theta)} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) f(\theta) + K \sin^2 \theta = M \quad (18)$$

$$\frac{1}{g(\phi)} \partial_\phi^2 g(\phi) = -M \quad (19)$$

La seconde équation nous donne donc que g est une fonction propre de \mathcal{L}_z^2 (et M ne dépend pas de l). De plus, M est valeur propre du carré d'un opérateur de rotation, donc est un carré dans \mathbb{N} , on notera $M = m^2$, en effet m est valeur propre de l'opérateur $J_z = \mathcal{L}_z$, et on a déjà fait le raisonnement pour montrer que $m \in \mathbb{N}$. \square

On va donc s'occuper des trois fonctions propres séparément.

6.1.1 Harmoniques sphériques

On peut trouver très facilement les fonctions propres de l'opérateur \mathcal{L}_z^2 . Cela revient à résoudre l'équation différentielle ordinaire du second ordre :

$$\partial_\phi^2 g(\phi) = -g(\phi)M$$

Comme $M > 0$, on a pour solutions les fonctions :

$$g_M(\phi) = C e^{\pm i\sqrt{M}\phi}$$

On détermine la constante, par $g_M(0) = g_M(2\phi)$ (continuité), et on écrit $M = m^2$ avec $m \in \mathbb{N}$, alors

$$g_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

On note que m est un paramètre, donc on a au moins autant d'harmoniques sphériques que de choix de m , car $Y(\theta, \phi) = f(\theta)g_m(\phi)$ par hypothèse. Il nous faut ensuite déterminer ses fonctions f .

On repart de l'équation :

$$\begin{aligned} 0 &= \sin\theta\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta)f(\theta) + l(l+1)f(\theta)\sin^2\theta - f(\theta)m^2 \\ &= \sin^2\theta\partial_\theta^2f(\theta) + \sin\theta\cos\theta + [(l(l+1) - m^2)]f(\theta) \end{aligned}$$

On pose le changement de variables :

$$\begin{cases} x = \cos\theta \\ dx = -\sin\theta d\theta \\ \sin^2\theta = 1 - \cos^2\theta = 1 - x^2 \end{cases}$$

Et on obtient l'équation différentielle dépendante de (l, m) , suivante :

$$(1-x^2)\partial_x^2f(x) - 2x\partial_xf(x) + l(l+1)f(x) - \frac{m^2}{1-x^2}f(x) = 0 \quad (20)$$

Cette équation différentielle ordinaire n'a de solutions régulières que sur $[-1, 1]$, dès que la condition $|l| \geq m$. On considère la même équation avec $m = 0$:

$$(1-x^2)\partial_x^2f(x) - 2x\partial_xf(x) + l(l+1)f(x) = 0 \quad (21)$$

Théorème 6.1.1. (Polynômes associés de Legendre) : Lorsque l est un entier, on définit le l -ième polynôme de Legendre P_l , comme l'unique fonction analytique définie sur $[-1, 1]$ qui résout l'équation (20).

Alors, si $|l| \geq m$, et m, l entiers, la fonction puissance $P_l^m(x) = (-1)^m(1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m}(P_l(x))$ est solution de l'équation (21).

Preuve : Les calculs étant un peu longs, on va faire une esquisse de preuve. En supposant l'existence f d'une solution analytique, on peut obtenir une relation de récurrence sur les coefficients de la série entière associée. Il suffit alors de prouver que tous les coefficients d'ordre supérieur (strictement) à $l \in \mathbb{N}$ (où $(1-x^2)\partial_x^2f(x) - 2x\partial_xf(x) + l(l+1)f(x) = 0$ est l'équation considérée) sont tous nuls, ce qui prouvera que c'est un polynôme. \square

Après changement de variables pour revenir à la variable θ , on obtient donc l'expression suivante pour les harmonies sphériques :

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)!(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}$$

Où $l \in \mathbb{N}$ est le nombre associé à la valeur propre λ de $-\Delta$ tel que $-\lambda = l(l+1)$ et m est la plus grande valeur propre de l'opérateur \mathcal{L}_z . La constante devant est une constante de normalisation.

$$P_\ell^m(x)$$

ℓ	m				
	0	1	2	3	4
0	1	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
1	x	$-(1-x^2)^{1/2}$	n.d.	n.d.	n.d.
2	$\frac{1}{2}(3x^2-1)$	$-3x(1-x^2)^{1/2}$	$3(1-x^2)$	n.d.	n.d.
3	$\frac{1}{2}(5x^3-3x)$	$-\frac{3}{2}(5x^2-1)(1-x^2)^{1/2}$	$15x(1-x^2)$	$-15(1-x^2)^{3/2}$	n.d.
4	$\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$	$-\frac{5}{2}(7x^3-3x)(1-x^2)^{1/2}$	$\frac{15}{2}(7x^2-1)(1-x^2)$	$-105x(1-x^2)^{3/2}$	$105(1-x^2)^2$

Premières solutions de l'équation (21)

6.1.2 Equation radiale

On considère désormais l'équation suivante ($V(r) = -\frac{1}{r}$) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{R(r)} \partial_r(r^2 \partial_r) R(r) - r^2(V(r) - \lambda) &= l(l+1) \\ \iff \partial_r(r^2 \partial_r) R(r) + [r + r^2 \lambda - l(l+1)] R(r) &= 0 \end{aligned}$$

On pose la variable suivante :

$$\begin{aligned} y(r) &= rR(r) \\ R(r) &= \frac{y(r)}{r} \end{aligned}$$

L'équation devient alors :

$$\partial_r^2 y(r) + \left[\frac{1}{r} + \lambda - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y(r) = 0$$

Le prochain changement de variables est très simple, et permet des simplifications de notations lorsqu'on devra résoudre cette EDO : On pose $(\frac{\epsilon}{2})^2 = -\lambda$, ($\lambda < 0$)

$$\begin{cases} x = r\epsilon \\ dx = \epsilon dr \end{cases}$$

D'où après changement de variables :

$$\partial_x^2 y(x) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{1}{\epsilon x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] y(x) = 0$$

Dernière étape avant la résolution, on pose :

$$\begin{cases} k = 2l + 1 \\ j = \frac{\frac{4}{\epsilon} - k - 1}{2} \end{cases}$$

ce qui nous donne la forme finale :

$$\partial_x^2 y(x) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{2j+k+1}{2x} - \frac{k^2-1}{4x^2} \right] y(x) = 0 \quad (22)$$

Cette équation est une version modifiée de l'équation associée de Laguerre, dont la résolution est résumée dans ce théorème, non démontré, pour cause de trop nombreux calcul, comme pour le dernier théorème.

Théorème 6.1.2. (Les équations de Laguerre) : Le j -ième **polynôme de Laguerre** L_j est défini comme étant l'unique solution analytique à l'équation différentielle appelée **Equation de Laguerre** :

$$x\partial_x^2 L_j(x) + (1-x)\partial_x L_j(x) + jL_j(x) = 0 \quad (23)$$

Le (k, j) -ième **polynôme associé de Laguerre** L_j^k est défini par

$$L_j^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{j+k}(x)$$

et est solution de l'EDO appelée **Equation associée de Laguerre** :

$$x\partial_x^2 L_j^k(x) + (1-x+k)\partial_x L_j^k(x) + jL_j^k(x) = 0 \quad (24)$$

Enfin, les fonctions $y_j^k : x \mapsto e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{k+1}{2}} L_j^k(x)$ sont des solutions analytiques de l'équation (22).

On va ensuite exprimer ces solutions radiales en fonction des nombres quantiques. On en a déjà introduit deux, que sont l et m , et on pose désormais $n := j + l + 1$. En remarquant que :

$$\begin{aligned} k &= 2l + 1 \\ \frac{k+1}{2} &= l + 1 \\ j &= n - l - 1 \end{aligned}$$

Avec cette nouvelle notation, on remarque que :

$$\begin{aligned} \frac{2j+k+1}{2} &= \frac{2j+(2l+1)+1}{2} = j+l+1 = n \\ \frac{\epsilon^2}{4} &= \frac{1}{4n^2} = -\lambda \end{aligned}$$

On a donc une dépendance en fonction de n des niveaux d'énergie : $\lambda_n = -\frac{1}{4n^2}$. Les solutions de l'équation 22 sont :

$$y_n^l(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \quad (25)$$

Il suffit alors de faire les deux changements de variables dans l'autre sens, déjà $x = r\epsilon$, avec la dépendance de n :

$$\begin{aligned} x &= \frac{r}{n} \\ \implies y_n^l(r) &= e^{-\frac{r}{2n}} \left(\frac{r}{n}\right)^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{r}{n}\right) \end{aligned}$$

Enfin, on n'oublie pas que :

$$\begin{aligned} y(r) &= rR(r) \\ \implies R(r) &= \frac{1}{n} e^{-\frac{r}{2n}} \left(\frac{r}{n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{r}{n}\right) \end{aligned}$$

Pour finir, on demande à cette fonction d'être normalisé (c'est une des règles de la mécanique quantique, afin de pouvoir interpréter ψ comme une densité de probabilité). On ajoute donc une constante d'intégration normalisatrice, les solutions radiales normalisées sont donc :

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{1}{n^3} \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-\frac{r}{2n}} \left(\frac{r}{n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{r}{n}\right)$$

6.2 Fonction d'onde de l'atome d'hydrogène

Tout le travail a été fait. Il ne reste plus qu'à mettre tout ensemble dans un seul gros théorème. Voici donc la classification des orbitales atomiques (i.e des états propres) de l'atome d'hydrogène. C'est en fait un des rares

cas que l'on sait résoudre explicitement. Dès lors qu'on rajoute un autre électron, les calculs, à moins d'hypothèses fortes, ne sont plus faisables aussi précisément.

On peut appeler cela un théorème, toutes les notions physiques associées sont en effet reliées comme on a vu, à des notions mathématiques cohérentes.

Théorème 6.2.1. *Les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire sont données par :*

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi n^3} \frac{(n-l-1)! (2l+1)! (l-m)!}{2n[(n+l)!]^3 (l+m)!}} e^{-\frac{r}{2n}} \left(\frac{r}{n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{r}{n}\right) (-1)^m P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

où :

$$L_j^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{j+k}(x)$$

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} (P_l(x))$$

De plus, les fonctions L_n et P_n peuvent se calculer de la façon suivante pour $n \in \mathbb{N}$:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]$$

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^n]$$

L'ensemble des états propres est donc décrit en dimension 3 par 3 nombres entiers : (n, l, m) tel que $n + 1 \geq l \geq m$

n est appelé **nombre quantique principal**

l est appelé **nombre quantique azimutal**

m est appelé **nombre quantique magnétique**

Juste pour le plaisir, voici la formule en une seule ligne :

$$\begin{aligned} \psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = & \left[\frac{1}{2n^2} \sqrt{\frac{1}{2\pi} \frac{(n-l-1)! (2l+1)! (l-m)!}{[(n+l)!]^3 (l+m)!}} \right] \\ & \times \left[-\left(\frac{r}{n}\right)^l \frac{e^{-\frac{r}{2n}}}{(n+l)!} \frac{d^{2l+1}}{dr^{2l+1}} \left\{ e^{\frac{r}{n}} \frac{d^{n+l}}{dr^{n+l}} \left[e^{-\frac{r}{n}} \frac{r^{n+l}}{n} \right] \right\} \right] \\ & \times \left[\frac{(-1)^l}{2^l l!} \sin^{\frac{m}{2}}(\theta) \frac{d^m}{d\theta^m} \left\{ \frac{d^l}{d\theta^l} [\sin^{2l} \theta] \right\} \right] \\ & \times [e^{im\phi}] \end{aligned}$$

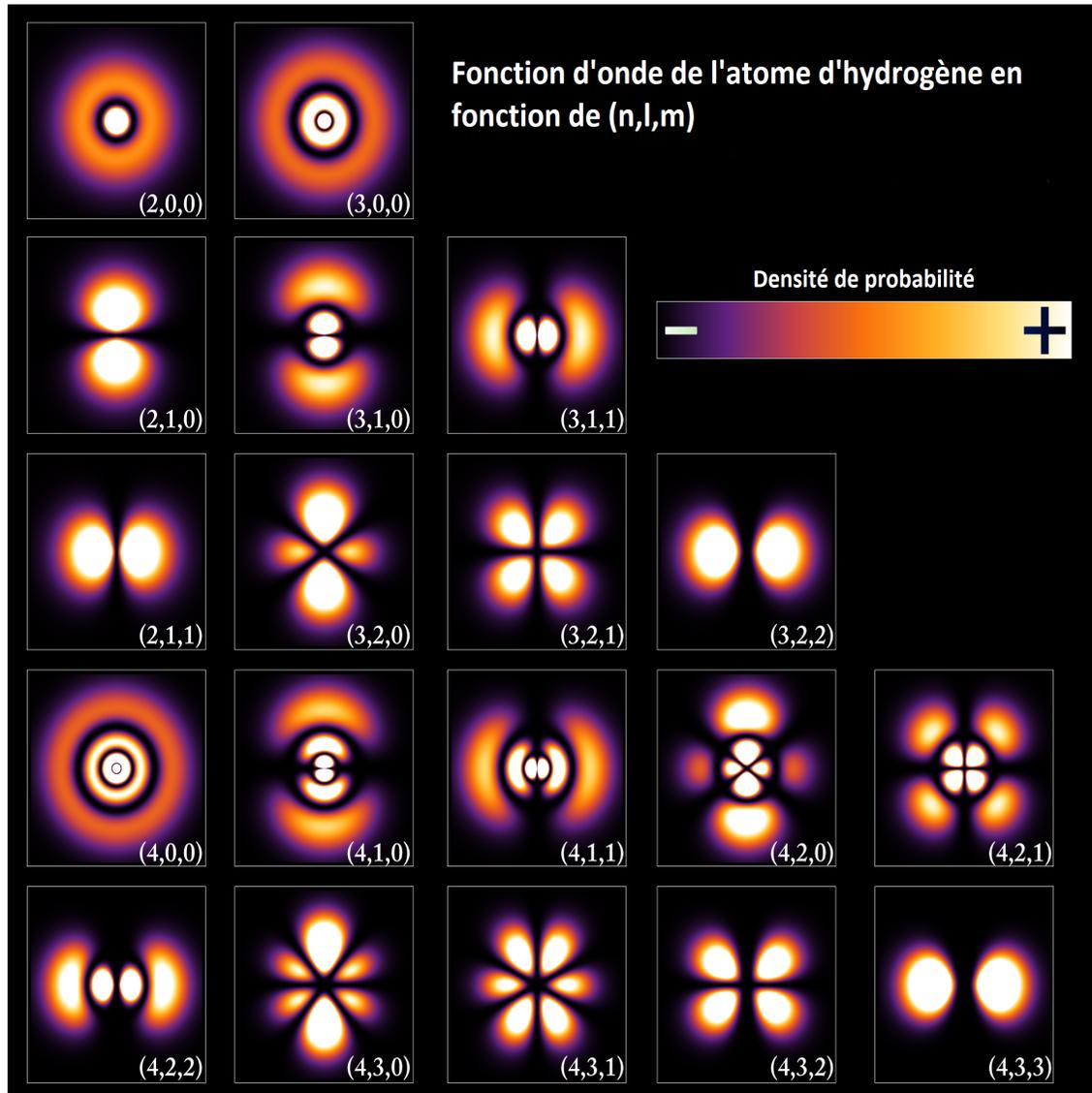
Pour terminer, on peut visualiser ci dessous quelques orbitales pour certains triplets quantiques (n, l, m) . La densité de probabilité est claire là où l'électron a le plus de chance d'être, et sombre là où il ne passe jamais. La représentation est faite en coupe, où le centre correspond au noyau de l'atome.

La densité de probabilité n'est pas directement ψ , mais plutôt son module au carré $|\psi|^2$. C'est cette quantité qui est normalisée, et qui s'interprète donc comme la probabilité de présence de l'électron. Il est évidemment à prendre en compte que chacun des états propres étant solution, une combinaison linéaire d'état propre sera donc toujours solution. Il est possible en fait de montrer que ces fonctions d'ondes forment une base de tous les états quantiques possibles pour l'atome d'hydrogène.

Ce qu'on a montré en réalité, c'est que l'espace $L^2(\mathbb{S}^2)$ peut se décomposer comme :

$$L^2(\mathbb{S}^2) = \hat{\bigoplus} V_l$$

Où V_l sont les espaces propres associés aux valeurs propres $\lambda = l(l+1)$ de l'opérateur de Laplace-Beltrami. Ce sont des espaces de dimension $2l+1$ (mais on ne l'a pas démontré) qui correspondent simplement à une décomposition spectrale, comme celle de Fourier par exemple.



Représentation en coupe des différentes orbitales atomiques

7 Bibliographie

[1] *Michael Reed, Barry Simon, Methods of modern mathematical physics 1*, Academic Press, 1983.

[2] *Edward B. Davies, Spectral Theory and Differential Operators*, Cambridge studies in advanced mathematics, Cambridge University Press 1995.

[3] *Michael E. Taylor*, **Partial Differential Equations 1 : Basic Theory**, Applied Mathematical Sciences 115, Springer 1996.