

# *Remerciements*

*En premier lieu, je tiens à remercier notre "Dieu" qui nous à donner le courage et la volonté pour réaliser ce travail.*

*Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur, "GHOUTI DJELLOULI", Maitre de conférence -A- à l'université de Saïda, pour avoir accepté d'encadrer ce mémoire. je tiens à lui témoigner ma gratitude et ma reconnaissance car ce travail n'aurait jamais vu le jour sans son aide considérable, je voudrais également lui exprimer ma sincère remerciements, malgré toutes ses occupations, était toujours à l'écoute de mes préoccupations et de mes questions, et qui m'a aide à progresser.*

*Je remercie d'avance Monsieur "T. Guendouzi ", Maitre de conférence -A- à l'université de Saïda, pour sa présence à ma soutenance de master et, pour l'honneur qu'il me fait en présidant ce jury.*

*Je suis également très reconnaissant à Monsieur "K. Djerfi", Maitre assistant -A- à l'université de Saïda, pour toute l'aide qu'il m'a accordée durant du travail, en acceptant d'être examinateur de ce travail.*

*Je remercie profondément Monsieur "A. Azzouz" , Maitre de conférence -B- à l'université de Saïda, pour l'intérêt constant qu'il a porté à ce travail en acceptant de le juger.*

*Je remercie aussi Mlle "Abbes Hafida", Maitre assistant -A- à l'université de Saïda, pour sa présence.*

*Je tiens à remercier à titre individuel mon enseignante Mme Sahraoui, et à mes adorables : Guendouzi Kheira, Boutaleb Halima et Hamadouche Zahra qui j'ai passé des moments sympathiques.*

*Encore quelque lignes, sans doute trop courtes, pour exprimer tout mon amour et ma gratitude à mes chers parents, à mes sœurs et mes frères pour leur soutien, et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce modeste projet.*



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Eléments de la théorie spectrale</b>	<b>9</b>
1.1	Opérateurs non bornés dans un espace de Hilbert . . . . .	9
1.1.1	Opérateurs non bornés : définitions et propriétés élémentaires	9
1.1.2	Opérateurs symétriques et auto-adjoints . . . . .	11
1.2	Spectre d'un opérateur non borné . . . . .	14
1.2.1	Spectre et résolvante . . . . .	14
1.2.2	Classification du spectre . . . . .	16
1.2.3	Cas des opérateurs auto-adjoints . . . . .	17
1.3	Théorème spectral pour les opérateurs auto-adjoints . . . . .	18
1.3.1	Famille spectrale . . . . .	18
1.3.2	Décomposition spectrale d'un opérateur auto-adjoint . . . . .	20
1.4	Perturbation d'opérateurs auto-adjoints . . . . .	20
1.4.1	Théorème de Kato-Rellich . . . . .	20
1.4.2	Théorème de Weyl . . . . .	22
<b>2</b>	<b>Opérateur de Schrödinger unidimensionnel</b>	<b>25</b>
2.1	Introduction . . . . .	25
2.2	Eléments de la mécanique quantique . . . . .	26
2.2.1	Mécanique classique . . . . .	26
2.2.2	Mécanique quantique . . . . .	27
2.2.3	Onde plane et équation de Schrödinger . . . . .	28
2.3	Autour du Laplacien . . . . .	30
2.3.1	Laplacien Libre . . . . .	30

2.3.2	Problèmes aux bords . . . . .	30
2.4	Opérateur de Schrödinger . . . . .	33
2.4.1	Caractère auto-adjoint de l'opérateur de Schrödinger . . . . .	34
2.4.2	Discretion du Spectre de l'opérateur de Schrödinger . . . . .	40
2.5	Valeurs propres négatives . . . . .	44
2.5.1	Cas d'un opérateur défini sur un demi-axe . . . . .	44
2.5.2	Cas d'un opérateur défini sur $\mathbb{R}$ . . . . .	54
<b>3</b>	<b>Zéros et comportement asymptotique des fonctions propres</b>	<b>57</b>
3.1	Théorèmes sur les zéros des fonctions propres . . . . .	57
3.2	Théorèmes sur le comportement asymptotique des solutions de cer- tains équations différentielles de second ordre . . . . .	60
3.2.1	Cas d'un potentiel intégrable . . . . .	61
3.2.2	Potentiel de diffusion sur la droite réelle . . . . .	71

# Introduction

L'étude de l'équation de Schrödinger a commencé dans des articles de Schrödinger en 1926. On y retrouve la formulation de l'équation, le calcul des niveaux d'énergie de l'hydrogène et le début d'une théorie des perturbations appliqués à l'étude des effets Stark et Zeeman.

La théorie mathématique de la mécanique quantique et des opérateurs de Schrödinger revient plutôt à J. Von Neumann, dans un livre publié en 1932. Dans celui-ci, Von Neumann introduit le cadre hilbertien de la mécanique quantique et démontre l'équivalence avec l'approche matricielle de Heisenberg et celle de Schrödinger. Une des contributions remarquables de cet ouvrage est la théorie mathématique des opérateurs auto-adjoints non bornés. Von Neumann insiste beaucoup sur le fait que les opérateurs de Schrödinger doivent toujours être auto-adjoints.

La vision de von Neumann a été développée et appliquée avec succès durant les années 50. Les résultats les plus remarquables ont sans aucun doute été ceux de T. Kato, qui débuta une étude rigoureuse des opérateurs de Schrödinger et démontra que les opérateurs correspondant aux atomes les plus simples sont bien auto-adjoints.

Plusieurs autres thèmes furent développés dans les décennies qui suivrent.

Ce mémoire est divisé en trois chapitres. Le premier chapitre pose les bases les plus classiques : définition des opérateurs non bornés, de l'adjoint... jusqu'au théorème spectral qui donne une représentation de tout opérateur auto-adjoint comme un opérateur maximal de multiplication dans un espace  $L^2$ .

Le deuxième chapitre aborde les opérateurs de Schrödinger. Nous avons tenu à y ajouter une introduction à la formulation mathématique de la mécanique quantique,

qui permet de remplacer l'étude dans un contexte plus physique par le contexte mathématique. D'autre part on introduit des outils qui seront utiles pour l'étude des opérateurs de Schrödinger. Il s'agit principalement de donner des conditions pour lesquelles on peut trouver des extensions auto-adjointes, ou de donner des résultats de stabilité.

Cet essai est une introduction aux rudiments de la théorie des opérateurs linéaires non bornés dans l'espace de Hilbert. L'exemple présenté est un modèle simple mais pertinent de physique des solides.

Nous travaillons dans une seule dimension, de sorte que la seule variable indépendante est  $x$ . Sous souci de simplicité, nous considérons une forme dimension de l'équation :

$$-\Psi + V(x)\psi = E\psi.$$

Les propriétés qui auront le plus d'impact sur le système sont (a) en supposant qu'il est infini en étendue, ce qui nous permet d'éviter soucier des conditions aux limites, et (b) en supposant que la fonction potentielle  $V$  est mesurable et localement de carré intégrable. La section locale carré-intégrabilité veillera à ce que  $V(x)\psi$  est dans  $L^2(\mathbb{R})$  pour certaines fonctions particulièrement bien comportées ( $\mathcal{C}(\mathbb{R})$ ).

Le troisième chapitre est consacré à l'étude de comportement asymptotique et zéros des fonctions propres de l'opérateur de Schrödinger tout on donons une autre preuve de discrétisation du spectre de l'opérateur.

# Notations

$\mathcal{H}$  : Espace de Hilbert.

$\mathcal{H}^1, \mathcal{H}^2$  : Espaces de Sobolev.

$L^2(\mathbb{R})$  : Espace des fonctions mesurable de carrés intégrable.

$C_0^\infty(\mathbb{R})$  : Espace des fonctions continues sur  $\mathbb{R}$  à support compact.

$A$  : Opérateur non borné.

$D(A)$  : Domaine de  $A$ .

$G(A)$  : Graphe de  $A$ .

$\| \cdot \|_A$  : Norme du graphe.

$R_A(\lambda)$  : Résolvante de  $A$ .

$\sigma_{disc}(A)$  : Spectre discret de  $A$ .

$\sigma_{ess}(A)$  : Spectre essentiel de  $A$ .

$\Delta$  : Laplacien usuel dans  $\mathbb{R}$ .

$H_0$  : Hamiltonnien.

$V$  : Potentiel.

$H$  : extension adjointe de  $H_0$ .

$N_-(H)$  : Nombre des valeurs propres négatives de  $H$ .



# Chapitre 1

## Eléments de la théorie spectrale

Dans le cas d'un opérateur borné, on pouvait toujours supposer que son domaine est l'espace tout entier. Dans le cas d'un opérateur non borné il n'en est pas de même; le domaine de l'opérateur devra toujours être précisé et, lorsqu'on effectuera des opérations algébriques sur des opérateurs non bornés, les questions de domaine devront être examinées avec soin.

Donc l'étude des domaines est indispensable pour ce type d'opérateurs.

### 1.1 Opérateurs non bornés dans un espace de Hilbert

#### 1.1.1 Opérateurs non bornés : définitions et propriétés élémentaires

Soit  $\mathcal{H}$  un espace de Hilbert et  $A$  un opérateur dans  $\mathcal{H}$ , défini sur un espace vectoriel  $D(A) \subset \mathcal{H}$  à valeurs dans  $\mathcal{H}$  appelé domaine de  $A$ , on note  $G(A)$  le graphe de  $A$  défini par

$$G(A) = \{(u, f) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H} : u \in D(A), f = Au\}.$$

Le plus souvent, nous travaillerons avec des opérateurs dont le domaine de définition est dense dans  $\mathcal{H}$

**Définition 1.1.1.** •  $A$  est à domaine dense (ou densément défini) si  $D(A)$  dense dans  $\mathcal{H}$ .

• Si  $A_1$  est un autre opérateur dans  $\mathcal{H}$  tel que  $G(A) \subset G(A_1)$ , alors  $A_1$  est appelé extension de  $A$ . Dans ce cas, on écrit  $A \subset A_1$ . Il est clair que  $A_1$  est une extension de  $A$  si et seulement si  $D(A) \subset D(A_1)$  et  $Au = A_1u$  pour  $u \in D(A)$ .

La catégorie des opérateurs fermés est la classe fondamentale parmi les opérateurs linéaires qui généralise d'une façon naturelle celle des opérateurs bornés.

**Définition 1.1.2.** •  $A$  fermé :  $\forall (u_n) \in D(A)$ ,  $u_n \rightarrow u$ ,  $Au_n \rightarrow v \Rightarrow u \in D(A)$ ,  $v = Au$ .

•  $A$  est dit fermable s'il admet une extension fermée.

**Théorème 1.1.1. (du graphe fermé).**

Soit  $A$  un opérateur de  $\mathcal{H}$  dans  $\mathcal{H}$ . Deux des trois conditions suivantes entraînent la troisième :

1.  $A$  est fermé
2.  $D(A)$  est fermé
3.  $A$  est borné

**Proposition 1.1.1.** Soit  $A$  un opérateur fermable. Alors il existe une extension  $\overline{A}$  de  $A$  telle que  $\overline{A} \subset A_1$  pour toute autre extension fermée  $A_1$ . De plus,  $G(\overline{A}) = \overline{G(A)}$ .

**Preuve :**

Soit  $A_1$  une extension fermée de  $A$ . Alors  $G(A_1) \supset G(A)$  et donc  $G(A_1) \supset \overline{G(A)}$ . On conclut que  $\overline{G(A)}$  ne contient pas d'éléments de la forme  $(0, f)$  avec  $f \neq 0$ . On définit un opérateur  $B$  par  $D(B) = \{u \in \mathcal{H} : \text{il existe } f \in \mathcal{H} \text{ tel que } (u, f) \in \overline{G(A)}\}$ ,  $Bu = f$ , où  $f$  est l'unique vecteur tel que  $(u, f) \in \overline{G(A)}$ . Il est évident que  $G(B) = \overline{G(A)}$  et  $G(B) \subset G(A_1)$  pour toute extension fermée  $A_1$ . Donc,  $B = \overline{A}$ .

■

**Remarque 1.1.1.** L'écriture du fait que  $A$  est fermable en termes de  $A$  et  $D(A)$  est la suivante :

•  $A$  fermable :  $\forall (u_n) \in D(A)$ ,  $u_n \rightarrow 0$ ,  $Au_n \rightarrow v \Rightarrow v = 0$ .

**Exemple 1.1.1.** Soit  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$ ,

$$D(A) = C_0^\infty(\mathbb{R}^n), \quad Au = -\Delta u. \quad (\text{le Laplacien usuel dans } \mathbb{R}^n)$$

$A$  est fermable,  $\bar{A} = -\Delta$ ,  $D(\bar{A}) = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$ .

Dans la suite, on appelle  $\bar{A}$  la fermeture de  $A$ . Signalons qu'il existe des opérateurs qui ne sont pas fermables.

### 1.1.2 Opérateurs symétriques et auto-adjoints

**Définition 1.1.3.** Soit  $A$  un opérateur dans un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$ . On note  $D(A^*)$  l'ensemble des vecteurs  $v \in \mathcal{H}$  pour lesquels il existe  $f \in \mathcal{H}$  tel que :

$$\langle Au, v \rangle = \langle u, f \rangle \quad \text{pour tout } u \in D(A). \quad (1.1)$$

Pour tout  $v \in D(A^*)$  on pose  $A^*v = f$ , où  $f$  désigne le vecteur vérifiant (1.1). On appelle  $A^*$  l'opérateur adjoint de  $A$ .

**Remarque 1.1.2.** • Comme  $D(A)$  dense, le vecteur  $f$  dans (1.1) est unique, donc  $A^*$  est bien défini.

• Clairement  $D(A^*) = \{u \in \mathcal{H} \text{ tel que } |\langle Au, v \rangle| \leq C \|v\|, u \in D(A)\}$ , par le Théorème de Riesz. L'adjoint  $A^*$  se décrit de manière complète à l'aide de son graphe.

**Proposition 1.1.2. i)**  $G'(A^*) = G(-A)^\perp$ .

**ii)** Soit  $A$  un opérateur à domaine dense. Alors :

1.  $A^*$  est fermé.
2.  $A$  est fermable si  $D(A^*)$  est dense et on a alors  $\bar{A} = A^{**}$ .
3. Si  $A$  est fermable,  $\bar{A}^* = A^*$ .
4.  $A_1 \subset A_2 \Rightarrow A_2^* \subset A_1^*$ .

Le point 2) de la Proposition est souvent utile pour montrer qu'un opérateur  $A$  est fermable.

**Théorème 1.1.2.** Soit  $A$  un opérateur dans  $\mathcal{H}$ . Alors les propriétés suivantes ont lieu :

- i)  $A^*$  est fermé.  
 ii)  $A$  est fermable si et seulement si  $D(A^*)$  est dense, et dans ce cas  $\overline{A} = A^{**}$ .  
 iii) Si  $A$  est fermable, alors  $(\overline{A})^* = A^*$ .

**Preuve :**

i) On définit un opérateur unitaire  $V : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \times \mathcal{H}$  par  $V(u, v) = (-v, u)$ . Il est facile à vérifier que  $V(E^\perp) = V(E)^\perp$  pour tout sous-espace  $E \subset \mathcal{H} \times \mathcal{H}$ . La définition de l'opérateur adjoint implique que

$$G(A^*) = VG(A)^\perp. \quad (1.2)$$

Comme  $VG(A)^\perp$  est toujours fermé, on conclut que  $A^*$  est fermé.

ii) Supposons que  $D(A^*)$  est dense. Alors

$$\overline{G(\overline{A})} = (G(A)^\perp)^\perp = (V^2G(A)^\perp)^\perp = (VG(A^*))^\perp = G(A^{**}) \quad (1.3)$$

où on a utilisé la relation (1.2). La proposition 1.1.2 implique que  $\overline{A} = A^{**}$ .

Réciproquement, si  $D(A^*)$  n'est pas dense dans  $\mathcal{H}$ , alors il existe un vecteur  $w \neq 0$  tel que  $w \in D(A^*)^\perp$ . Dans ce cas,  $(w, 0) \in G(A^*)^\perp$ , d'où on voit que  $(0, w) \in VG(A^*)^\perp$ . La relation (1.3) montre maintenant que  $(0, w) \in \overline{G(\overline{A})}$ , et donc  $A$  n'est pas fermable.

iii) Si  $A$  est fermable, alors

$$A^* = \overline{A^*} = A^{***} = (\overline{A})^*.$$

■

**Définition 1.1.4.** Un opérateur  $A$  dans un espace de Hilbert est dit *symétrique* si  $A \subset A^*$ , c'est-à-dire,  $D(A) \subset D(A^*)$ ,  $Au = A^*u$  pour  $u \in D(A)$ .

Il est clair que  $A$  est symétrique si et seulement si  $\langle Au, v \rangle = \langle u, Av \rangle$  pour  $u \in D(A)$ .

Un opérateur  $A$  est dit *auto-adjoint* si  $A = A^*$  avec  $D(A^*) \subset D(A)$ .

**Remarque 1.1.3.** • Si  $A$  est symétrique, alors  $A$  fermable et  $A \subset A^{**} \subset A^*$ .

- Si  $A$  est fermé et symétrique, alors  $A = A^{**} \subset A^*$ .
- Si  $A$  est auto-adjoint, alors  $A = A^{**} = A^*$ .

**Théorème 1.1.3.** *Soit  $A$  un opérateur symétrique dans  $\mathcal{H}$ . Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

- i)  $A$  est auto-adjoint.
- ii)  $A$  est fermé et  $\ker(A^* \pm iI) = \{0\}$ .
- iii)  $\text{Im}(A \pm iI) = H$ .

**Preuve :**

i)  $\Rightarrow$  ii) Comme l'opérateur  $A$  est auto-adjoint, il est fermé. Si  $A^*u = \pm iu$ , alors  $Au = \pm iu$  et  $\langle Au, u \rangle = \pm i \langle u, u \rangle$ . Comme  $\langle Au, u \rangle$  est réel, on conclut que  $u = 0$ .

ii)  $\Rightarrow$  iii) Montrons d'abord que  $\text{Im}(A - i)$  est dense dans  $\mathcal{H}$ . Supposons que  $v \in \text{Im}(A - i)^\perp$ . Alors  $\langle (A - i)u, v \rangle = 0$  pour tout  $u \in D(A)$ . Donc,  $\langle Au, v \rangle = \langle u, -iv \rangle$  pour tout  $u \in D(A)$ , d'où on voit que  $v \in D(A^*)$  et  $A^*v = -iv$ . Comme  $\text{Ker}(A^* + i) = \{0\}$ , on conclut que  $v = 0$ .

Montrons maintenant que  $\text{Im}(A - i)$  est fermé. Soit  $\{u_n\} \subset D(A)$  une suite telle que  $(A - i)u_n \rightarrow g$ . On veut montrer que  $g \in \text{Im}(A - i)$ . Comme

$$\|(A - i)u\|^2 = \|Au\|^2 + \|u\|^2,$$

on voit que la suite  $\{u_n\}$  converge vers un élément  $u$  et  $Au_n$  converge  $g + iu$ . En utilisant le fait que  $A$  est fermé, on conclut que  $u \in D(A)$  et  $Au = g + iu$ . Donc,  $(A - i)u = g$ .

L'espace vectoriel  $\text{Im}(A - i)$  étant dense et fermé, il est confondu avec  $\mathcal{H}$ . La démonstration de la relation  $\text{Im}(A + i) = \mathcal{H}$  est analogue.

iii)  $\Rightarrow$  i) Il faut montrer que  $D(A^*) \subset D(A)$ . Soit  $u \in D(A^*)$ . Alors il existe  $v \in D(A)$  tel que  $(A - i)v = (A^* - i)u$ . Comme  $A \subset A^*$ , on voit que

$$(A^* - i)(u - v) = 0. \tag{1.4}$$

L'argument utilisé dans la démonstration de l'implication (ii)  $\Rightarrow$  (iii) montre que si  $\text{Im}(A + i) = H$ , alors  $\text{Ker}(A^* - i) = \{0\}$ . Il résulte de (1.4) que  $u = v \in D(A)$ . Donc,  $D(A^*) \subset D(A)$ , et l'opérateur  $A$  est auto-adjoint.

■

**Définition 1.1.5.** Soit  $A$  un opérateur symétrique. On dit que  $A$  est essentiellement auto-adjoint si sa fermeture est auto-adjointe.

**Corollaire 1.1.1.** Soit  $A$  un opérateur symétrique dans  $\mathcal{H}$ . Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :

- i)  $A$  est essentiellement auto-adjoint.
- ii)  $\text{Ker}(A^* \pm iI) = \{0\}$ .
- iii)  $\text{Im}(A \pm iI)$  est dense dans  $\mathcal{H}$ .

## 1.2 Spectre d'un opérateur non borné

La notion de spectre se définit bien pour les opérateurs fermés. Soit  $A$  un opérateur linéaire fermé. Alors  $D(A)$  muni de la norme du graphe :  $\|u\|_A = \|Au\| + \|u\|$  est un espace de Banach, et on peut considérer  $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$  comme un opérateur borné entre deux espaces de Banach.

### 1.2.1 Spectre et résolvante

**Définition 1.2.1.** Soit  $A$  un opérateur non-borné à domaine dense. On appelle résolvant de  $A$ , et on note  $\rho(A)$  l'ensemble des  $\lambda \in \mathbb{C}$  tels que

$(A - \lambda I)$  est inversible de  $D(A)$  dans  $\text{Im}(A - \lambda I)$  est son inverse est borné'.

L'application  $R_A : \rho(A) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$  définie par  $R_A = (A - \lambda I)^{-1}$  est appelée la résolvante de  $A$ .

Voici une proposition qui justifiera le fait que l'on travaillera souvent avec des opérateurs fermés :

**propriété 1.2.1.** Si  $A$  n'est pas fermé alors  $\rho(A) = \emptyset$ .

**Preuve :**

Si  $A$  n'est pas fermé alors  $(A - \lambda I)$  et  $R_A$  ne sont pas fermés. Supposons que  $\lambda \in \rho(A)$ , alors  $R_A$  est défini sur  $\mathcal{H}$  et est borné donc d'après le théorème du graphe fermé,  $R_A$  est fermé. C'est absurde.

■

**Définition 1.2.2.** Le spectre  $\sigma(A)$  de  $A$  est le complémentaire de  $\rho(A)$  dans  $\mathbb{C}$ .

1. Le spectre ponctuel  $\sigma_p(A)$  de  $A$  est l'ensemble des  $\lambda \in \mathbb{C}$  tels que  $\text{Ker}(A - \lambda I) \neq \{0\}$ .
2. Le spectre continu  $\sigma_c(A)$  est l'ensemble des  $\lambda \in \mathbb{C}$  tels que  $\text{Ker}(A - \lambda I) = \{0\}$ ,  $\text{Im}(A - \lambda I)$  est dense, et  $(A - \lambda I)^{-1} : \text{Im}(A - \lambda I) \rightarrow D$  n'est pas borné.
3. Le spectre résiduel  $\sigma_r(A)$  est l'ensemble des  $\lambda \in \mathbb{C}$  tels que  $\text{Ker}(A - \lambda I) = \{0\}$  et  $\text{Im}(A - \lambda I)$  n'est pas dense.

On a bien sur

$$\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \cup \sigma_r(A)$$

Lorsque  $A$  est un opérateur fermé, on peut voir que  $\rho(A)$  est l'ensemble des  $\lambda \in \mathbb{C}$  tels que  $(A - \lambda I) : D \rightarrow \mathcal{H}$  soit bijectif, et son inverse est borné. En effet dans ce cas, si  $\lambda \in \rho(A)$ ,  $(A - \lambda I)^{-1}$  s'étend automatiquement en un opérateur borné sur  $\mathcal{H}$ .

**Remarque 1.2.1.** Par le théorème de l'application ouverte, le fait que  $(A - \lambda I) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  soit bijectif entraîne automatiquement que son inverse est borné. Pour  $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ , l'ensemble résolvant est donc l'ensemble des  $\lambda \in \mathbb{C}$  tels que  $(A - \lambda I) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  est bijectif.

**Proposition 1.2.1.** L'ensemble  $\rho(A)$  est un ouvert de  $\mathbb{C}$ , et  $R_A$  est une application holomorphe, par exemple dans le sens où, pour tout  $u, v \in \mathcal{H}$ ,  $\lambda \mapsto \langle R_A(\lambda)u, v \rangle$  est holomorphe.

Enfin pour  $\lambda \in \rho(A)$  on a

$$\frac{1}{\text{dist}(\lambda, \sigma(A))} \leq \|R_A(\lambda)\|. \quad (1.5)$$

**Preuve :**

Soit  $\lambda_0 \in \rho(A)$ . Pour  $\lambda \in \rho(A)$  la première formule de la résolvante itérée donne

$$R_A(\lambda) = \sum_{j=0}^n (\lambda - \lambda_0)^j R_A(\lambda_0)^{j+1} + (\lambda - \lambda_0)^{n+1} R_A(\lambda_0)^{n+1} R_A(\lambda)$$

ce qui conduit à poser  $R_\infty(\lambda) = \sum_{j=0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0)^j R_A(\lambda_0)^{j+1}$  pour  $\lambda \in \mathbb{C}$  tel que  $|\lambda - \lambda_0| \leq \|R_A(\lambda_0)\|^{-1}$ . On montre alors facilement que  $R_\infty(\lambda)$  est l'inverse de  $(A - \lambda)$  pour ces  $\lambda$  là, ce qui prouve la proposition. ■

On déduit de l'estimation ci-dessus le critère suivant :

**Proposition 1.2.2.** *Soit  $A$  un opérateur fermé.  $\lambda \in \mathbb{C}$  appartient au spectre de  $A$  s'il existe une suite  $(\psi_n)_n$  de  $D$  telle que  $\|\psi_n\| = 1$  et  $\|(A - \lambda)\psi_n\| \rightarrow 0$ . La réciproque est vraie si  $\lambda$  est un point du bord du spectre.*

**Preuve**

S'il existe une telle suite,  $\lambda$  ne peut appartenir à  $\rho(A)$  : sinon on aurait

$$1 = \|\psi_n\| = \|R_A(\lambda)(A - \lambda)\psi_n\| \leq C \|(A - \lambda)\psi_n\| \rightarrow 0,$$

ce qui est absurde.

Réciproquement, supposons que  $\lambda \in \partial\sigma(A)$ . Soit  $(\lambda_n)$  une suite de  $\rho(A)$  telle que  $\text{dist}(\lambda_n, \lambda) = \frac{1}{n}$ . D'après l'inégalité (1.5), il existe une suite  $\tilde{\phi}_n$  telle que  $\|\tilde{\phi}_n\| = 1$  et  $\|R(\lambda_n)\tilde{\phi}_n\| \geq n$ .

On pose  $\phi_n = \frac{\tilde{\phi}_n}{\|R(\lambda_n)\tilde{\phi}_n\|}$ . Alors  $\|\phi_n\| \rightarrow 0$  et si  $\psi_n = R(\lambda_n)\phi_n$  on a  $\|\psi_n\| = 1$  et

$$(A - \lambda)\psi_n = (A - \lambda_n)\psi_n + (\lambda_n - \lambda)\psi_n = \phi_n + (\lambda_n - \lambda)\psi_n,$$

ce qui montre que  $\|(A - \lambda)\psi_n\| \rightarrow 0$ . ■

## 1.2.2 Classification du spectre

### Spectre discret- spectre essentiel

La notion de spectre essentiel et de spectre discret est d'une très grande importance. Nous verrons que le spectre de certains opérateurs s'interprète à l'aide des états

stationnaires du système.

Afin d'éviter toute confusion entre les spectres discrets et ponctuels, rappelons que le spectre ponctuel est par définition l'ensemble des valeurs propres de  $A$ , c'est-à-dire l'ensemble des  $\lambda \in \mathbb{C}$  tels que  $(A - \lambda)$  n'est pas injectif.

**Définition 1.2.3.** *On appelle spectre discret d'un opérateur  $A$  l'ensemble des valeurs propres de multiplicité finie qui sont isolées dans  $\sigma(A)$  (c'est-à-dire telles qu'il existe  $\varepsilon > 0$  tel que  $]\lambda - \varepsilon; \lambda + \varepsilon[ \cap \sigma(A) = \{\lambda\}$ ), et on le note  $\sigma_{disc}(A)$ .*

*On appelle spectre essentiel de  $A$  le complémentaire du spectre discret dans  $(\sigma(A))$ , et on le note par  $\sigma_{ess}(A) : \sigma_{ess}(A) = \sigma(A) \setminus \sigma_{disc}(A)$ .*

Le spectre discret est inclus dans le spectre ponctuel défini plus haut, mais l'inclusion inverse est fautive en général. De même, le spectre continu est inclus dans le spectre essentiel sans que la réciproque ne soit pas toujours vraie.

On voit que  $\lambda_0 \in \sigma_{disc}(A)$  si et seulement s'il existe  $\varepsilon > 0$  tel que le projecteur  $E(]\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon[)$  est de rang fini. De même,  $\lambda_0 \in \sigma_{ess}(A)$  si et seulement si pour tout  $\varepsilon > 0$ , le projecteur  $E(]\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon[)$  n'est pas de rang fini.

### 1.2.3 Cas des opérateurs auto-adjoints

On remarque d'abord que le spectre résiduel d'un opérateur auto-adjoint est toujours vide. En effet si  $\text{Ker}(A - \lambda I) = \text{Ker}(A^* - \lambda I) = \{0\}$ , alors  $(\text{Im}(A - \lambda))^\perp = \{0\}$ . On a aussi la

**Proposition 1.2.3.** *Soit  $A$  un opérateur fermé symétrique.  $A$  est auto-adjoint si et seulement si  $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ .*

**Preuve :**

Supposons que  $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ . Alors, par exemple,  $\text{Im}(A \pm i) = \mathcal{H}$ , donc  $A$  est essentiellement auto-adjoint d'après le corollaire 1.1.1.

Réciproquement, si  $A$  est auto-adjoint, pour  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ ,  $(A - \lambda)$  est injectif puisque si  $\lambda = x + iy \in \mathbb{C}$ , on a  $\|(A - \lambda)u\|^2 = \|(A - x)u\|^2 + y^2 \|u\|^2 \geq y^2 \|u\|^2$ . Puisque  $\text{Im}(A + \lambda)^\perp = \text{ker}(A - \bar{\lambda})$ , on voit que  $\text{Im}(A - \lambda)$  est dense dans  $\mathcal{H}$ , et on a montré aussi que  $\|(A - \lambda)^{-1}\| \leq \frac{1}{|y|}$ . Donc  $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \subset \rho(A)$ .

■

Puisque  $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ , tous les points du spectre d'un opérateur auto-adjoint sont des points de son bord. On a donc le critère suivant :

**Proposition 1.2.4.** *Soit  $A$  un opérateur auto-adjoint.  $\lambda \in \mathbb{C}$  appartient au spectre de  $A$  si et seulement s'il existe une suite  $(\psi_n)$  de  $D$  telle que*

$$\|\psi_n\| = 1 \text{ et } \|(A - \lambda)\psi_n\| \rightarrow 0.$$

## 1.3 Théorème spectral pour les opérateurs auto-adjoints

### 1.3.1 Famille spectrale

**Définition 1.3.1.** *Une famille spectrale est une famille  $(E_\gamma)_{\gamma \in \mathbb{R}}$  de projecteurs orthogonaux sur  $\mathcal{H}$  telle que*

1. *Pour tout  $u \in \mathcal{H}$ ,  $E_\gamma u \rightarrow 0$  quand  $\gamma \rightarrow -\infty$ , et  $E_\gamma u \rightarrow u$  quand  $\gamma \rightarrow +\infty$ .*
2. *Pour tout  $\gamma, \mu \in \mathbb{R}$ ,  $E_\gamma E_\mu = E_{\min(\gamma, \mu)}$ .*
3. *Pour tout  $u \in \mathcal{H}$ ,  $E_\gamma u \rightarrow E_{\gamma_0} u$  quand  $\gamma \rightarrow \gamma_0^+$ .*

Voici un exemple de famille spectrale :

**Exemple 1.3.1.** *Soit  $K \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  un opérateur compact et symétrique. On sait qu'il existe une suite de sous-espaces  $\mathcal{H}_k$  de dimension finie deux à deux orthogonaux, et une suite  $(\gamma_k)_k$  bornée de réels telles que  $\mathcal{H} = \bigoplus_{k \in \mathbb{N}} \mathcal{H}_k$  et pour  $u \in \mathcal{H}_k$ ,  $Ku = \gamma_k u$ . On note  $\Pi_k$  le projecteur orthogonal sur  $\mathcal{H}_k$  et  $E_\gamma$  le projecteur orthogonal sur  $\mathcal{G} = \bigoplus_{\gamma_k \leq \gamma} \mathcal{H}_k$ . La famille  $E_\gamma$  est une famille spectrale : la propriété 1 découle du fait que la suite  $(\gamma_k)$  est bornée, et les propriétés 2 et 3 découlent de la définition de  $\mathcal{G}$ . On note que*

$$\lim_{\gamma \rightarrow \gamma_k^-} E_\gamma u = E_{\gamma_k} u - \Pi_k u.$$

En particulier, au sens des distributions on a

$$\partial_\gamma (E_\gamma u) = \delta_{\gamma_k} \Pi_k u,$$

et donc

$$u = \sum \Pi_k u = \int d(E_\gamma u), \quad Ku = \sum \gamma_k \Pi_k u = \int \gamma d(E_\gamma u).$$

Le résultat qui suit porte le nom de Théorème Spectral.

**Théorème 1.3.1.** *Soit  $A$  un opérateur auto-adjoint. Il existe une famille spectrale  $(E_\gamma)_{\gamma \in \mathbb{R}}$  telle que  $D = \{u \in H, \int \gamma^2 d \langle E_\gamma u, v \rangle < +\infty\}$ , et pour tout  $u, v \in D$ ,*

$$\langle Au, v \rangle = \int \gamma d \langle E_\gamma u, v \rangle.$$

Où  $d \langle E_\gamma u, v \rangle$  est la mesure de Stieltjes associée à la fonction  $\gamma \mapsto \langle E_\gamma u, v \rangle$ .

Le spectre de  $A$  peut être caractérisé à partir sa famille spectrale. En utilisant la Proposition 1.2.4, on peut montrer la

**propriété 1.3.1.** *Soit  $A$  un opérateur auto-adjoint, et  $(E_\gamma)$  sa famille spectrale.  $\gamma_0 \in \mathbb{R}$  appartient à  $\sigma(A)$  si et seulement si, pour tout  $\varepsilon > 0$ ,  $E([\gamma_0 - \varepsilon, \gamma_0 + \varepsilon]) \neq 0$ . On a noté  $E(]a, b]) = \int_a^b dE_\gamma = E_b - E_a$ .*

Voici un corollaire très simple mais très utile du théorème spectral :

**Proposition 1.3.1.** *Soit  $A$  un opérateur auto-adjoint. Pour  $u \in D$  et  $\lambda \in \mathbb{R}$ , on a*

$$\text{dist}(\lambda, \sigma(A)) \|u\| \leq \|(A - \lambda)u\|. \quad (1.6)$$

**Preuve :**

On a  $\|(A - \lambda)u\|^2 = \int (\gamma - \lambda)^2 d \langle E_\gamma u, u \rangle$ .

Pour  $\lambda \in \rho(A)$  et  $u = R_A(\lambda)v$  avec  $\|v\| = 1$ , on obtient  $\|R_A(\lambda)\| \leq \frac{1}{\text{dist}(\lambda, \sigma(A))}$ , et compte tenu de la Proposition 1.2.1,

$$\|R_A(\lambda)\| = \frac{1}{\text{dist}(\lambda, \sigma(A))} \quad (1.7)$$

On retrouve en particulier le fait que, pour un opérateur auto-adjoint,

$$\forall \lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}, \|R_A(\lambda)\| = \frac{1}{\text{Im} \lambda}.$$

■

### 1.3.2 Décomposition spectrale d'un opérateur auto-adjoint

**Théorème 1.3.2.** *Supposons que  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  est un opérateur non borné auto-adjoint à un inverse compact. Alors*

1.  $\sigma(A)$  peut être rangé sous forme d'une suite croissante qui tend vers  $+\infty$ ,
2.  $D(A) = \{v \in \mathcal{H} / \sum_j |\lambda_j|^2 \langle v, y_j \rangle^2 < \infty\}$ ,
3.  $Av = \sum_j \lambda_j \langle v, y_j \rangle y_j, v \in D(A)$ .

## 1.4 Perturbation d'opérateurs auto-adjoints

D'un point de vue très général, on dit que l'opérateur  $A+B$  est une perturbation de l'opérateur  $A$  lorsque  $A+B$  a les mêmes propriétés que  $A$ . On donne ici deux critères concernant les perturbations d'un opérateur auto-adjoint  $A$  : le premier permet de dire que  $A+B$  est encore auto-adjoint, et le second que le spectre essentiel de  $A+B$  est le même que celui de  $A$ . Il faut remarquer que le spectre discret ne peut pas rester stable par perturbation, aussi petite soit-elle.

### 1.4.1 Théorème de Kato-Rellich

**Définition 1.4.1.** *Soit  $A$  et  $B$  deux opérateurs, avec  $D(A) \subset D(B)$ . On dit que  $B$  est  $A$ -borné lorsque pour un  $a > 0$ , il existe  $b > 0$  tel que, pour tout  $u \in D(A)$ ,  $\|Bu\| \leq a \|Au\| + b \|u\|$ .*

*La borne inférieure de l'ensemble des  $a > 0$  pour lesquels cette propriété est vraie est appelée borne relative de  $B$  pour  $A$ .*

Lorsque  $A$  est auto-adjoint, en appliquant le théorème du graphe fermé, on peut voir que tout opérateur fermé  $B$  tel que  $D(A) \subset D(B)$  est  $A$ -borné. Ce qui suit repose sur le

**Lemme 1.4.1.** *Soit  $A$  un opérateur auto-adjoint, et  $B$  un opérateur tel que  $D(A) \subset D(B)$ .  $B$  est  $A$ -borné si et seulement si il existe  $\lambda \in \rho(A)$  tel que  $BR_A(\lambda)$  est un opérateur borné (c'est alors le cas pour tout  $\lambda \in \rho(A)$  grâce à la première formule de*

la résolvante). La borne relative  $a$  de  $B$  pour  $A$  est donnée par

$$a = \lim_{\gamma \rightarrow +\infty} \|BR_A(\pm i\gamma)\|.$$

**Preuve :**

Supposons que  $BR_A(\pm i\gamma)$  soit borné pour  $u_n > 0$ . Par la première formule de la résolvante c'est vrai pour tout  $\gamma > 0$ , et on note  $\|BR_A(\pm i\gamma)\| = a_\gamma$ . On a immédiatement

$$\|Bu\| \leq a_\gamma \|Au\| + \gamma a_\gamma \|u\|,$$

ce qui montre que  $B$  est  $A$ -borné et que sa borne relative  $a$  vérifie pour tout  $\gamma > 0$  l'inégalité  $a \leq \|BR_A(\pm i\gamma)\|$ , donc  $a = \lim_{\gamma \rightarrow +\infty} \inf \|BR_A(\pm i\gamma)\|$ .

Réciproquement, supposons que  $B$  soit  $A$ -borné, de borne relative  $a$ . Pour  $\varepsilon > 0$ , il existe  $b > 0$  tel que  $\|BR_A(\pm i\gamma)u\| \leq (a + \varepsilon) \|AR_A(\pm i\gamma)u\| + b \|R_A(\pm i\gamma)u\|$ .

Or par le théorème spectral, on a  $\|R_A(\pm i\gamma)u\| \leq \frac{1}{\gamma} \|u\|$  et

$$\|AR_A(\pm i\gamma)u\|^2 = \int \frac{\mu^2}{\mu^2 + \gamma} d \langle E_\mu u, u \rangle \leq \|u\|^2$$

Donc  $\|BR_A(\pm i\gamma)u\|$  est un opérateur borné de norme inférieure à  $(a + \varepsilon) + b/\gamma$ . Ceci étant vrai pour tout  $\varepsilon > 0$ , on voit que  $\lim_{\gamma \rightarrow +\infty} \sup \|R_A(\pm i\gamma)u\| \leq a$ .

■

Voilà enfin le Théorème de Kato-Rellich.

**Théorème 1.4.1.** *Soit  $A$  un opérateur auto-adjoint (resp. essentiellement auto-adjoint), et  $B$  un opérateur symétrique  $A$ -borné de borne relative inférieure à 1. Alors  $(D(A), A+B)$  est auto-adjoint (resp. essentiellement auto-adjoint).*

**Preuve :**

Supposons  $A$  auto-adjoint. D'après le lemme précédent, il existe  $\gamma > 0$  tel que  $\|BR_A(\pm i\gamma)\| < 1$ , et donc  $I + BR_A(\pm i\gamma)$  est inversible.

Or  $(A + B \pm i\gamma) = (I + BR_A(\pm i\gamma))(A \pm i\gamma)$ , donc  $(A + B \pm i\gamma)$  est d'image dense.

■

### 1.4.2 Théorème de Weyl

**Définition 1.4.2.** Soit  $A$  un opérateur fermé et  $B$  un opérateur tel que  $D(A) \subset D(B)$ . On dit que  $B$  est  $A$ -compact lorsqu'il existe  $\lambda \in \rho(A)$  tel que  $BR_A(\lambda)$  est compact (c'est alors le cas pour tout  $\lambda \in \rho(A)$  grâce à la première formule de la résolvante).

Si  $B$  est  $A$ -compact,  $B$  est  $A$ -borné de borne relative 0. Cela découle du Lemme 1.4.1 et de l'identité  $BR_A(i\gamma) = (BR_A(i))(A + i)RA(i\gamma)$  : le premier opérateur est compact, et le second tend vers 0 fortement quand  $\gamma \rightarrow +\infty$  (par exemple avec le théorème spectral). Le théorème de Kato-Rellich peut donc s'appliquer dans ce cas.

**Théorème 1.4.2.** *Théorème de Weyl.*

Si  $A$  est un opérateur auto-adjoint, et  $B$  un opérateur symétrique  $A$ -compact, alors  $(D(A), A + B)$  est auto-adjoint et

$$\sigma_{ess}(A + B) = \sigma_{ess}(A).$$

**Remarque 1.4.1.** Le théorème de Weyl sert aussi sous la forme suivante : s'il existe  $\lambda \in \rho(A + B) \cap \rho(A)$  tel que  $R_{A+B}(\lambda) - R_A(\lambda)$  est compact, alors

$$\sigma_{ess}(A + B) = \sigma_{ess}(A).$$

Cet énoncé entraîne le précédent compte tenu de la seconde identité de la résolvante :

$$R_{A+B}(\lambda) = -R_A(\lambda)BR_{A+B}(\lambda) = -R_{A+B}(\lambda)BR_A(\lambda).$$

**Preuve :**

On prouve le théorème sous la forme énoncée dans la remarque. Soit  $\gamma \in \sigma_{ess}(A + B)$ ,  $\gamma \neq \lambda$ , et  $(u_n)$  une suite de Weyl pour  $A + B$  et  $\gamma$ . On va montrer que  $(v_n = R_A(\lambda)u_n)$  (après normalisation) est une suite de Weyl pour  $A$  et  $\lambda$ . D'abord  $(v_n)$  tend faiblement vers 0, mais pas fortement (donc est normalisable) puisque :

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \|v_n\| = \lim_{n \rightarrow +\infty} \|R_{A+B}(\lambda)u_n\| = |\gamma - \lambda|^{-1} \neq 0.$$

De plus on a

$$\begin{aligned}(A - \gamma)v_n &= (A - \gamma)R_A(\lambda)u_n \\ &= u_n + (\lambda - \gamma)R_A(\lambda)u_n \\ &= u_n + (\lambda - \lambda)R_{A+B}(\lambda)u_n - Ku_n \\ &= R_{A+B}(\lambda)(A + B - \gamma)u_n - Ku_n\end{aligned}$$

où  $K = R_{A+B}(\lambda) - R_A(\lambda)$  est compact par hypothèse, ce qui montre que  $\|(A - \gamma)v_n\| \rightarrow 0$ .

La réciproque s'obtient en échangeant les rôles de  $A + B$  et  $A$ .

■



# Chapitre 2

## Opérateur de Schrödinger unidimensionnel

### 2.1 Introduction

Dans ces deux derniers chapitres, on étudie des opérateurs de Schrödinger de la forme :

$$Hy = -y'' + V(x)y$$

où  $V$  est une fonction à valeurs réelles, appelée **potentiel**. Pour des raisons historiques,  $H$  est appelé **hamiltonien**.

Une grande partie des motivations de l'étude des opérateurs de Schrödinger provient de la théorie quantique. Nous tenterons d'en donner quelques bases en première partie. Mais il faut noter que notre approche sera volontairement simple d'un point de vue physique. Cependant, et c'est bien la notre but, cela permettra d'esquisser les liens entre la mécanique quantique et la théorie spectrale des opérateurs non bornés. Nous essaierons de montrer comment les divers outils introduits jusqu'ici peuvent être d'une très grande utilité lorsqu'il s'agit d'étudier des opérateurs qui ont une réalité physique.

En particulier, nous verrons qu'il est absolument nécessaire que l'hamiltonien soit auto-adjoint. Cet impératif physique est vraiment difficile à justifier mathématiquement et entre dans le cadre d'une théorie que nous ne pourrions pas développer ici.

Ce qui est certain, c'est qu'une partie importante de l'étude des opérateurs de Schrödinger est la recherche de conditions sous lesquelles l'opérateur défini possède une extension auto-adjointe.

Enfin, l'étude du spectre de ces opérateurs est aussi d'une importance primordiale et nous verrons comment on peut utiliser les théorèmes exposés jusqu'ici pour en déduire des propriétés importantes. Evidemment, le lecteur devra se souvenir qu'il ne s'agit ici que d'une introduction et pourra se référer à divers ouvrages mathématiques ou physiques pour un exposé plus complet.

On propose avant d'entamer ces aidées de passer en revue quelques uns des résultats les plus frappants dans ce domaine, où la mécanique quantique s'interprète souvent en termes de quantités classiques. On s'appuiera sur l'approche due à *A. Martinez* de l'arsenal technique semiclassique développée principalement par *B. Helffer et J. Sjöstrand*. Enfin, suivant des travaux de *N. Burq*, Ces notes ne contiennent pas de matériel original. Pour l'essentiel, elles reposent sur le livre d'*André Martinez* [1], sur celui de *Mouez Dimassi et Johannes Sjöstrand* [14], et sur des articles de *W. Hunziker* [24], et *Nicolas Burq et Maciej Zworski* [17].

## 2.2 Eléments de la mécanique quantique

### 2.2.1 Mécanique classique

La trajectoire  $\mathbb{R} \ni t \mapsto x(t) \in \mathbb{R}^d$  dans l'espace à  $d$  dimensions, d'une particule ponctuelle de masse  $m$  soumise à un champ de force  $F(x)$  qu'on suppose indépendant du temps pour simplifier, est décrite par la loi de Newton (ou Principe Fondamental de la Dynamique)

$$mx''(t) = F(x(t)). \tag{2.1}$$

La dérivée  $x'(t)$  est la vitesse de la particule à l'instant  $t$ , et  $x''(t)$  son accélération. De manière équivalente, l'équation (2.1) peut s'écrire

$$\begin{cases} x'(t) = \frac{1}{m}\xi'(t), \\ \xi'(t) = -F(x(t)), \end{cases} \tag{2.2}$$

où  $\xi(t) := mx'(t)$  est le moment de la particule. La courbe  $(x(t), \xi(t))$  apparaît alors comme courbe intégrale du champ de vecteur hamiltonien  $H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  défini par

$$H(x, \xi) = \begin{pmatrix} \xi/m \\ F(x) \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

En raison des lois de transformation sous changement de coordonnées par exemple, il est important de distinguer les variables  $x$  et  $\xi$ . On choisit de considérer  $H$  comme une fonction sur  $T^*\mathbb{R}^d$  plutôt que sur  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ , à valeurs dans l'espace des vecteurs tangents  $T(T^*\mathbb{R}^d)$  à  $T^*\mathbb{R}^d$ . Disons que cette distinction ne prend vraiment son sens que dans le cas où l'espace dans lequel se déplace la particule est une variété  $M$  plutôt que  $\mathbb{R}^d$ .

Lorsque le champ de force dérive d'un potentiel, *i.e.*  $F(x) = -\nabla V(x)$  pour une certaine fonction  $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  assez régulière, l'énergie de la particule, définie comme somme de son énergie cinétique et de son énergie potentielle

$$p(t) = \frac{1}{2m}\xi(t)^2 + V(x(t)), \quad (2.4)$$

est constante le long de la trajectoire  $t \mapsto \exp(tH)(x, \xi)$  :

$$\partial_t p(t) = \frac{1}{m}\xi(t) \cdot \partial_t \xi(t) + \nabla V(x(t)) \cdot \partial_t x(t) = 0, \quad (2.5)$$

en utilisant (2.2).

On note aussi que le champ hamiltonien  $H$  s'obtient à partir de la fonction  $p : (x, \xi) \mapsto \frac{1}{2m}\xi^2 + V(x)$ , et l'on écrit  $H = H_p$  :

$$H(x, \xi) = H_p(x, \xi) = \partial_\xi p(x, \xi) \partial_x - \partial_x p(x, \xi) \partial_\xi. \quad (2.6)$$

### 2.2.2 Mécanique quantique

Plusieurs expériences physiques ont conduit à des résultats que la mécanique classique ne pouvait pas expliquer, et qui semblaient même contradictoires entre eux. En particulier, l'étude du rayonnement du corps noir, puis la mise en évidence de l'effet photoélectrique, semblaient suggérer que la lumière était constituée de particules individualisées, d'énergie bien déterminée auxquelles on donna le nom de quanta. D'un

autre côté l'expérience des fentes de *Young*, montrait que la lumière avait un comportement d'onde, susceptible d'engendrer des figures de type franges d'interférences.

E. Schrödinger, en raisonnant par analogie avec l'optique, proposa un modèle qui permet de prévoir avec une précision extraordinaire les résultats des expériences précédentes, et qui, de ce fait, s'est imposé dans le monde de la physique des particules.

### 2.2.3 Onde plane et équation de Schrödinger

On appelle onde plane de vecteur d'onde  $k$  et de pulsation  $\omega$  la fonction

$$\phi(t, x) = e^{i(k \cdot x - \omega t)}. \quad (2.7)$$

On note que, à  $t$  fixé,  $\phi(t, x)$  est constante sur tout (hyper-) plan perpendiculaire à  $k$ , et l'on dit que l'onde plane se propage dans la direction de  $k$ .

Supposons que cette onde plane décrit une particule quantique d'impulsion  $\xi$ , le seul choix raisonnable est de poser  $\xi = \alpha k$  pour une certaine constante réelle  $\alpha$ . Niels Bohr proposa

$$\xi = h\omega = \hbar\nu, \quad (2.8)$$

où  $\nu = 2\pi\omega$  est la fréquence de l'onde plane, et  $\hbar = h/2\pi$ , et ce choix s'est révélé judicieux. On note aussi  $E = h\nu = \hbar\omega$  l'énergie de la particule, et avec ces notations, l'onde plane (2.7) s'écrit

$$\phi(t, x) = e^{i(\xi \cdot x - Et)/\hbar} \quad (2.9)$$

Mais l'énergie cinétique  $E_c$  de la particule doit être  $E_c = \frac{\xi^2}{2m}$ , et l'on voit que

$$E_c \phi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(t, x), \quad \Delta = \sum_{j=1}^d \partial_j^2. \quad (2.10)$$

Si la particule est placée dans un potentiel  $V(x)$ , son énergie totale  $E$  est la somme de  $V$  et de son énergie cinétique. Notant que, par (2.9),  $E\phi(t, x) = \frac{\hbar}{i} \partial_t \phi(t, x)$ , on obtient l'équation de Schrödinger :

$$\frac{\hbar}{i} \partial_t \phi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(t, x) + V(x) \phi(t, x). \quad (2.11)$$

On voit apparaître dans cette équation l'opérateur de Schrödinger :

$$P(x, hD_x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x). \quad (2.12)$$

Il s'agit d'un opérateur différentiel que l'on peut obtenir en remplaçant formellement  $\xi$  par  $hD_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x$  dans l'énergie classique  $p(x, \xi)$ .

Schrödinger postule alors que les particules quantiques sont associées aux solutions  $\phi(t, x)$  de l'équation de Schrödinger, qui vérifient la condition de normalisation, pour chaque  $t$  fixé,

$$\|\phi(t, \cdot)\|_{L^2} = \int |\phi(t, x)|^2 dx = 1. \quad (2.13)$$

La fonction  $\phi(t, x)$  est appelée fonction d'onde de la particule, et la quantité  $|\phi(t, x)|^2$  peut alors être interprétée comme la densité de probabilité de présence de la particule. En d'autres termes,

$$\|1_\Omega(x)\phi(t, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \left( \int 1_\Omega(x)|\phi(t, x)|^2 dx \right)^{1/2} \quad (2.14)$$

est la probabilité de présence de la particule dans la région  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  à l'instant  $t$ . Il faut noter que l'onde plane (2.9) n'est pas dans  $L^2(\mathbb{R}^d)$ , mais que toute fonction de  $L^2(\mathbb{R}^d)$  s'écrit comme superposition d'ondes planes (on parle de paquet d'ondes)

$$\phi(t, x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int \psi(\xi) e^{i(\xi \cdot x - Et)/\hbar} d\xi$$

(où  $t$  est fixé) : c'est le théorème de *Fourier-Plancherel*. En particulier on peut considérer l'onde plane comme "limite" d'un paquet d'onde gaussien :

$$g(t, x) = \int e^{ix \cdot \xi/\hbar} e^{-itE/\hbar} e^{-(\xi-\eta)^2/2\hbar} d\xi. \quad (2.15)$$

On est tout de suite confronté au problème suivant : l'équation de Schrödinger (2.11) n'a pas de sens immédiat pour une fonction  $\phi(t, \cdot)$  de  $L^2(\mathbb{R}^d)$ . On peut toujours considérer que  $P(x, hD_x)\phi(t, \cdot)$  est une distribution, mais l'égalité (2.11) pose la question de savoir si  $P(x, hD_x)\phi(t, \cdot)$  est une fonction de  $L^2(\mathbb{R}^d)$ . C'est *Von Neumann* qui a mis au point au début des années 1930 les notions mathématiques permettant de répondre correctement à ces questions : la théorie spectrale des opérateurs non-bornés (d'ailleurs la théorie des distributions de Laurent Schwartz est postérieure).

Puisque le potentiel  $V$  est indépendant de  $t$ , il est raisonnable de chercher des solutions de (2.11) à variables séparées  $t$  et  $x$ , c'est-à-dire sous la forme  $\phi(t, x) = \alpha(t)u(x)$ . On obtient pour une certaine constante  $E \in \mathbb{C}$ ,

$$a(t) = e^{-iEt}, \quad \text{et} \quad P(x, hD_x)u(x) = Eu(x), \quad (2.16)$$

l'équation pour  $u$  apparaît comme une équation aux valeurs propres pour l'opérateur  $P$ . Cette équation est appelée équation de Schrödinger stationnaire, et c'est notre principal sujet d'étude dans ce mémoire. Notons enfin que les énergies possibles d'une particule quantique en régime stationnaire sont les valeurs propres de l'opérateur non borné  $P$  sur  $L^2(\mathbb{R}^d)$ . Lorsque l'ensemble des valeurs propres est un ensemble discret, on obtient une quantification des niveaux d'énergie compatibles avec les expériences mettant en évidence l'aspect corpusculaire des particules quantiques.

*Références pour cette section* : [1], [2], [5], [6], [13].

## 2.3 Autour du Laplacien

### 2.3.1 Laplacien Libre

Le Laplacien  $-\Delta$  n'a aucune fonction propre dans  $L^2$ , mais il est, pour toute  $\lambda \in \mathbb{R}^+$  une fonction propre de  $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^m)$  (en fait dans  $L^\infty$ ) et pour tout  $\lambda \in \mathbb{C}$  une fonction propre dans  $D'(\mathbb{R}^m)$ . Alors, quelle est la bonne façon d'étendre la théorie des matrices hermitiennes sur  $\mathbb{C}^k$  ?

D'autre part, il est facile de construire des fonctions propres approchées sous la forme  $u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} \exp ix\xi \chi\left(\frac{x-n^2}{n}\right)$ , où  $\chi$  est une fonction à support compact de norme  $L^2$ -égal à 1.

### 2.3.2 Problemes aux bords

Considérons l'opérateur  $-\frac{d^2}{dx^2}$  et voyons les différents problèmes qui peuvent se poser naïvement sur l'existence de fonctions propres du problème à  $L^2(]0, 1[)$ .

### Position du problème

Examinons d'abord le couple  $(u, \lambda) \in \mathcal{H}^1(]0, 1[) \times \mathbb{C}$ , ( $u \neq 0$ ) tel que

$$\begin{cases} -d^2u/dx^2 = \lambda u, \\ u(0) = 0. \end{cases}$$

Il est immédiat de constater qu'aucun de ces paires existe. Examinons maintenant la paire  $(u, \lambda) \in \mathcal{H}^2(]0, 1[) \times \mathbb{C}$ , ( $u \neq 0$ ) tel que

$$-\frac{d^2}{dx^2}u = \lambda u$$

nous pouvons trouver pour tout  $\lambda$  deux solutions linéairement indépendantes.

Dans les lignes qui suivent, on se contente de donner quelques idées générales sans se baser sur les détails techniques !

### Problème de Dirichlet

On souhaite résoudre le problème suivant : trouver  $(u, \lambda) \in \mathcal{H}^2(]0, 1[) \times \mathbb{C}$ , ( $u \neq 0$ ) tel que

$$-\frac{d^2}{dx^2}u = \lambda u$$

tel que

$$\mathcal{H}^{2,D}(]0, 1[) = \{u \in \mathcal{H}^2(]0, 1[), u(0) = u(1) = 0\}$$

admet une solution non nulle.

#### Trois cas se présente :

- Cas  $\lambda < 0$  : On pose :  $\lambda = -\omega^2$ . Les solutions sont de la forme :

$$u(x) = A \cosh(\omega x) + B \sinh(\omega x).$$

On remarque que  $u(0) = 0$  entraîne  $A = 0$  et que  $u(1) = 0$  implique  $B \sinh(\omega) = 0$ .

La seule possibilité est  $u = 0$ .

- Cas  $\lambda = 0$  :  $u$  est alors affine et donc  $u = 0$ .
- Cas  $\lambda > 0$  : On pose  $\lambda = \omega^2$ . Les solutions sont de la forme :

$$u(x) = A \cos(\omega x) + B \sin(\omega x),$$

on trouve encore  $A = 0$  et  $B \sin(\omega x) = 0$ . Comme on ne veut pas  $B = 0$ , cela fixe  $\omega = n\pi$  avec  $n \in \mathbb{Z}, n \neq 0$ . On a donc trouvé une famille de  $\lambda$  qui convient :  $\lambda_n = n^2\pi^2$ . On peut clairement se restreindre à  $n \geq 1$ . Pour chaque  $\lambda_n$ , l'ensemble des solutions est de dimension 1 et est associé à la fonction  $u_n(x) = \sin(n\pi x)$ . On note que  $u_1 > 0$  sur  $(0, 1)$ .

**Remarque 2.3.1.** *Observons que  $\lambda = \pi^2$  est la plus petite valeur propre, de multiplicité un (simple) (Donc tous les espaces propres sont de dimension 1) et aucune fonction propre de ce sous-espace propre s'annule sur  $]0, 1[$*

### Problème de Neumann

On souhaite résoudre le problème suivant :  
trouver  $(u, \lambda) \in \mathcal{H}^{2,N}(]0, 1[) \times \mathbb{C}$ , ( $u \neq 0$ ) tel que

$$-\frac{d^2}{dx^2}u = \lambda u$$

où

$$\mathcal{H}^{2,N}(]0, 1[) = \{u \in H^2(]0, 1[), u'(0) = u'(1) = 0\}$$

admet une solution non nulle. De la même manière on peut montrer qu'on a  $\lambda_n = \pi^2 n^2$  et est associé à la fonction  $u_n = A \cos \pi n x$ , pour  $n \in \mathbb{N}$ ,  $A \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ . On constate que  $\lambda = 0$  est la plus petite valeur propre de multiplicité un et que l'espace propre correspondant est de dimension un et aucune fonction propre de ce sous-espace et nulle sur  $]0, 1[$  et aucune fonction propre associée ne s'annule sur  $]0, 1[$ .

### Problème périodique

On souhaite résoudre le problème suivant : trouver  $(u, \lambda) \in \mathcal{H}^{2,per}(]0, 1[) \times \mathbb{C}$ , ( $u \neq 0$ ) tel que

$$-\frac{d^2}{dx^2}u = \lambda u$$

sur

$$\mathcal{H}^{2,per}(]0, 1[) = \{u \in \mathcal{H}^2(]0, 1[), u(0) = u(1) \text{ et } u'(0) = u'(1) = 0\}$$

admet une solution non nulle.

Nous rappelons ici que  $\mathcal{H}^2(]0, 1[)$  est inclu dans  $C^1([0, 1])$  par le théorème d'injection

de *Sobolev*. C'est facile de montrer que les paires sont décrits par deux familles :

- $\lambda = 4\pi^2 n^2$ , associé à la fonction propre  $u_n = A \cos 2\pi n x$ , pour  $n \in \mathbb{N}$ ,  $A \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ ,
- $\lambda = 4\pi^2 n^2$ , associé à la fonction propre  $u_n = A \sin 2\pi n x$ , pour  $n \in \mathbb{N}^*$ ,  $A \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ .

On constate que  $\lambda = 0$  est la plus petite valeur propre d'ordre de multiplicité un. Cela signifie que l'espace propre correspondant est de dimension un (d'autres sous-espaces propres sont de dimension 2). De plus aucune fonction propre de ce sous-espace s'annule sur  $]0, 1[$ . Ceci est évident puisque  $u_0 = A \neq 0$ . On observe également qu'on peut trouver une base orthonormale dans  $L^2(]0, 1[)$  des fonctions propres en normalisant la famille  $(\cos 2\pi n x, (n \in \mathbb{N}), \sin 2\pi n x (n \in \mathbb{N}^*))$  ou de la famille  $\exp 2\pi i n x (n \in \mathbb{Z})$ .

### Conclusion

Tous ces exemples entre dans le cadre de la théorie de Sturm-Liouville. Nous avons mis l'accent sur une propriété qui a toujours été vérifiée dans chaque cas : l'espace propre correspondant à la plus petite valeur propre est unidimensionnelle et on peut trouver un usage strictement positif (dans  $]0, 1[$  ou dans  $] - \infty, +\infty[$  dans le cas de l'oscillateur harmonique) correspondant aux fonctions propres. Nous suggérons au lecteur de revenir à cette introduction, après avoir lu le mémoire. Il va sûrement se rendre compte que la théorie a permis de clarifier de nombreux problèmes parfois mal posés.

## 2.4 Opérateur de Schrödinger

On appelle opérateur de Schrödinger unidimensionnel un opérateur  $H_0$  agissant sur  $L^2(\mathbb{R})$  de la forme :

$$H_0 y = -y'' + V(x)y, \quad (2.17)$$

où  $y \in L^2(\mathbb{R})$  et  $V \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R})$  est une fonction réelle définie comme un opérateur linéaire non borné appelé potentiel.

**Remarque 2.4.1.**  $H_0$  est vu comme une perturbation du Laplacien par un opérateur de multiplication non borné  $V$ .

### 2.4.1 Caractère auto-adjoint de l'opérateur de Schrödinger

Une des premières questions à traiter lors de l'étude spectrale d'un opérateur linéaire est celle du caractère auto-adjoint, ou à défaut du caractère essentiellement auto-adjoint. Rappelons qu'un opérateur linéaire est essentiellement auto-adjoint si son unique extension est auto-adjointe.

La question qui sera posée, quel est l'intérêt du caractère auto-adjoint? Il y a au moins deux bonnes raisons d'en parler :

1. Si l'opérateur est auto-adjoint, on a déjà une première information spectrale importante le spectre de l'opérateur est une partie de  $\mathbb{R}$ .
2. Le caractère auto-adjoint assure en mécanique quantique l'unicité de la solution de l'équation de Schrödinger.

Puisque  $V$  n'a pas de propriété trop précise (par exemple  $V \in L_{loc}^\infty$ ), on ne peut pas donner un sens à  $H_0$  que sur  $C_0^\infty$ . Par une intégration par partie et comme ces espaces sont denses dans  $L^2(\mathbb{R}^n)$ ,  $H_0$  est évidemment symétrique. En revanche, on ne sait pas s'il est essentiellement auto-adjoint. Voici quelques uns des cadres classiques où c'est le cas.

**Remarque 2.4.2.** • *L'opérateur de Schrödinger consiste à prendre deux dérivées, il n'est donc clairement pas défini sur l'ensemble  $L^2(\mathbb{R})$ . En outre, dans le sous-espace sur lequel l'opérateur de Schrödinger est défini, il est un opérateur linéaire non borné sur  $L^2(\mathbb{R})$ .*

•  *$H_0$  l'opérateur de Schrödinger défini sur  $D(H_0) = C_0^\infty(\mathbb{R})$ , ( $D(H_0)$  est constitué des fonctions  $y$  ayant un support compact, absolument continue dérivable, et de telle sorte que  $H_0 y \in L^2(\mathbb{R})$ ). Notons que  $D(H_0)$  contient  $C_0^\infty(\mathbb{R})$ . Comme  $C_0^\infty(\mathbb{R})$  est dense dans  $L^2(\mathbb{R})$ ,  $D(H_0)$  est également dense dans  $L^2(\mathbb{R})$ ).*

**Lemme 2.4.1.**  *$H_0$  est un opérateur symétrique sur  $L^2(\mathbb{R})$ .*

**Preuve :**

soient  $z, y \in D(H_0) = C_0^\infty(\mathbb{R})$ .

$$\begin{aligned}
\langle z, H_0 y \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \bar{z}(x)(-y''(x) + V(x)y(x))dx \\
&= - \int_{\mathbb{R}} \bar{z}(x)y''(x)dx + \int_{\mathbb{R}} \bar{z}(x)V(x)y(x)dx \\
&= -\bar{z}(x)y'(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{\mathbb{R}} z'(x)y'(x)dx + \int_{\mathbb{R}} \bar{z}(x)V(x)y(x)dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} \bar{z}'(x)y'(x)dx + \int_{\mathbb{R}} \bar{z}(x)V(x)y(x)dx \\
&= \bar{z}''(x)y(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{\mathbb{R}} \bar{z}''(x)y(x)dx + \int_{\mathbb{R}} \bar{z}(x)V(x)y(x)dx \\
&= - \int_{\mathbb{R}} \bar{z}''(x)y(x)dx + \int_{\mathbb{R}} \bar{z}(x)V(x)y(x)dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} (-\bar{z}''(x) + V(x)\bar{z}(x))y(x)dx \\
&= \langle H_0 z, y \rangle .
\end{aligned}$$

**Théorème 2.4.1.** *Supposons que*

$$V(x) \geq -Q(x), \quad (2.18)$$

où  $Q$  est une fonction positive continue, et décroissante sur le demi plan  $x \geq 0$  est satisfaite

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{Q(2x)}} = \infty. \quad (2.19)$$

Alors  $H_0$  est essentiellement auto-adjoint.

**Preuve :**

Pour montrer que  $H_0^*$  est un opérateur symétrique, il est nécessaire d'examiner tout d'abord le domaine  $D(H_0^*)$  de  $H_0^*$ .

Premièrement, pour tout  $f \in D(H_0^*)$  alors  $f'$  est absolument continue et  $f'' \in L_{loc}^2(\mathbb{R})$ . En effet, soit  $g = H_0^* f$ , pour chaque  $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ , nous avons l'égalité :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{f(x)}\varphi''(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (V(x)\overline{f(x)} - \overline{g(x)})\varphi(x)dx.$$

Soit  $F = (V.f - g)''$ , alors en intégrant par partie on obtient ;

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}\varphi'' dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{F}.\varphi'' dx.$$

Par conséquent,  $(F - f)'' = 0$  au sens des distributions, *i.e.*  $F - f$  est une fonction affine. Ce qui prouve l'assertion précédente sur la différentiabilité de  $f$ . Le point important dans la preuve du théorème 2.4.1 est d'examiner le comportement de  $f \in D(H_0^*)$  quand  $x \rightarrow \infty$ .

**Proposition 2.4.1.** *Supposons que  $V$  satisfait (2.18). Alors  $f \in D(H_0^*)$  implique*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|f'|^2}{Q(2x)} dx < \infty. \quad (2.20)$$

**Preuve de la proposition :**

Considérons l'intégrale

$$\begin{aligned} I &= \int_{-w}^{+w} \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) \left(f''(x)\overline{f(x)} + f(x)\overline{f''(x)}\right) dx \\ &= \int_{-w}^{+w} \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) (f' \cdot \bar{f} + f \cdot \bar{f}')' dx - 2 \int_{-w}^{+w} \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) |f'|^2 dx. \end{aligned}$$

où  $w > 0$ . En intégrant par partie, on obtient

$$I = (f' \cdot \bar{f} + f \cdot \bar{f}') \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) \Big|_{-w}^{+w} - 2 \int_{-w}^{+w} \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) |f'|^2 dx + \frac{1}{w} \int_{-w}^{+w} (f' \cdot \bar{f} + f \cdot \bar{f}') \operatorname{sgn}(x) dx$$

où

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ -1 & \text{si } x < 0 \end{cases}.$$

En intégrant par partie encore une fois nous obtenons, puisque le premier terme s'annule,

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{w} \int_{-w}^{+w} (|f|^2)' \operatorname{sgn}(x) dx - 2 \int_{-w}^{+w} \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) |f'|^2 dx \\ &= -2 \int_{-w}^{+w} \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) |f'|^2 dx + \frac{1}{w} \{|f(w)|^2 + |f(-w)|^2 - 2|f(0)|^2\} \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} \int_{-w}^{+w} \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) |f'|^2 dx &= -\frac{1}{2} \int_{-w}^{+w} (f''\bar{f} + f\bar{f}'') \left(1 - \frac{|x|}{w}\right) dx \\ &\quad + \frac{1}{2w} \{|f(w)|^2 + |f(-w)|^2 - 2|f(0)|^2\}. \end{aligned}$$

Multiplions cette identité par  $w$ , intégrant par rapport à  $w$  sur  $[0, T]$ , et utilisant l'identité

$$\int_0^T \left( \int_{-w}^{+w} (w - |x|)c(x)dx \right) dw = \frac{1}{2} \int_{-T}^T (T - |x|)^2 c(x)dx,$$

obtenue par différentiation par rapport à  $T$  et en changeant l'ordre d'intégration, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{-T}^T (T - |x|)^2 |f'|^2 dx &= -\frac{1}{2} \int_{-T}^T (T - |x|)^2 (f''\bar{f} + f\bar{f}'') dx \\ &\quad + \int_0^T (|f(w)|^2 + |f(-w)|^2) dw - 2|f(0)|^2 T. \end{aligned}$$

En divisant les deux membres par  $T^2$ ,

$$\begin{aligned} \int_{-T}^T \left(1 - \frac{|x|}{T}\right)^2 |f'|^2 dx &= -\frac{1}{2} \int_{-T}^T \left(1 - \frac{|x|}{T}\right)^2 (f''\bar{f} + f\bar{f}'') dx + \\ &\quad + \frac{1}{T^2} \left( \int_{-T}^T (|f(w)|^2 + |f(-w)|^2) dw - 2|f(0)|^2 T \right) \end{aligned}$$

et en posant  $g = -f'' + Vf$  on a :

$$\begin{aligned} \int_{-T}^T \left(1 - \frac{|x|}{T}\right)^2 |f'|^2 dx &= \frac{1}{2} \int_{-T}^T \left(1 - \frac{|x|}{T}\right)^2 (g\bar{f} + \bar{g}f) dx - \\ &\quad - \int_{-T}^T \left(1 - \frac{|x|}{T}\right)^2 V(x)|f(x)|^2 dx + \frac{1}{T^2} \left( \int_{-T}^T |f(x)|^2 dx - 2|f(0)|^2 T \right). \end{aligned}$$

En tenant compte du fait que  $f, g \in L_2(\mathbb{R})$  et que  $0 \leq 1 - \frac{|x|}{T} \leq 1, \forall x \in [-T, T]$ , et puisque  $-V(x) \leq Q(x)$ , nous obtenons l'inégalité :

$$\int_{-T}^T \left(1 - \frac{|x|}{T}\right)^2 |f'|^2 dx \leq \int_{-T}^T \left(1 - \frac{|x|}{T}\right)^2 Q(x) |f|^2 dx + c,$$

où  $c$  ne dépend pas de  $T$ . Donc

$$\frac{1}{4} \int_{-T/2}^{T/2} |f'(x)|^2 dx \leq \int_{-T}^T Q \cdot |f|^2 dx + c. \quad (2.21)$$

Notons par :

$$\begin{aligned}\omega(T) &= \frac{1}{4} \int_{-T/2}^{T/2} |f'|^2 dx, \\ \chi(T) &= \int_{-T}^T Q \cdot |f|^2 dx + c.\end{aligned}$$

Maintenant considérons l'intégrale

$$\int_0^T \frac{\omega'(x) - \chi'(x)}{Q(x)} dx,$$

et en appliquant la deuxième formule de la moyenne (*i.e* si  $f$  est une fonction intégrable et  $K(x) \geq 0$  une fonction décroissante continue, alors il existe  $\xi \in [a, b]$  tel que  $\int_a^b f(x)K(x)dx = K(a) \int_a^\xi f(x)$ ). Alors, de l'égalité (2.21), on obtint :

$$\begin{aligned}\int_0^T \frac{\omega' - \chi'}{Q} dx &= \frac{1}{Q(0)} \int_0^\xi (\omega' - \chi') dx \\ &= \frac{1}{Q(0)} [\omega(\xi) - \chi(\xi) - \omega(0) + \chi(0)] \\ &\leq \frac{\chi(0) - \omega(0)}{Q(0)} = \text{const.}\end{aligned}$$

Puisque,

$$\begin{aligned}\omega'(x) &= \frac{1}{2} \left[ |f'(\frac{x}{2})|^2 + |f'(-\frac{x}{2})|^2 \right], \\ \chi'(x) &= Q(x) [|f(x)|^2 + |f(-x)|^2],\end{aligned}$$

alors on obtient immédiatement l'estimation

$$\frac{1}{8} \int_0^T \frac{|f'(\frac{x}{2})|^2 + |f'(-\frac{x}{2})|^2}{Q(x)} dx \leq \int_0^T (|f(x)|^2 + |f(-x)|^2) dx + c.$$

En remplaçant  $\frac{x}{2}$  par  $x$  et comme  $f \in L^2(\mathbb{R})$ , on obtient la Proposition 2.4.1.

■

**Preuve du théorème 2.4.1 :**

Soient  $f_1, f_2 \in D(H_0^*)$  et  $g_i = -f_i'' + V(x)f_i$ ,  $i = 1, 2$ . Nous devons montrer que

$\int_{-\infty}^{\infty} f_1 \overline{g_2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} g_1 \overline{f_2} dx$ . D'abord notons que

$$\begin{aligned} \int_{-t}^t (f_1 \overline{g_2} - g_1 \overline{f_2}) dx &= \int_{-t}^t (f_1 \overline{f_2''} - f_1'' \overline{f_2}) dx \\ &= \int_{-t}^t \frac{d}{dx} (f_1 \overline{f_2'} - f_1' \overline{f_2}) dx \\ &= (f_1 \overline{f_2'} - f_1' \overline{f_2}) \Big|_{-t}^t. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Posons

$$\rho(t) = \frac{1}{\sqrt{Q(2t)}}, \quad P(x) = \int_0^x \rho(t) dt.$$

En multipliant (2.22) par  $\rho(t)$  et en intégrant sur  $[0, T]$ , on obtient, pour le membre gauche (en changeant l'ordre de l'intégration)

$$\begin{aligned} \int_0^T \rho(t) \left( \int_{-t}^t (f_1 \overline{g_2} - g_1 \overline{f_2}) dx \right) dt &= \int_{-T}^T \left[ (f_1 \overline{g_2} - g_1 \overline{f_2}) \int_{|x|}^T \rho(t) dt \right] dx \\ &= \int_{-T}^T (f_1 \overline{g_2} - g_1 \overline{f_2}) (P(T) - P(|x|)) dx. \end{aligned}$$

Maintenant nous estimons le membre de droite de (2.22), par l'inégalité de *Cauchy-Schwarz*, on obtient :

$$\left| \int_0^T f_1(t) \overline{f_2'(t)} \rho(t) dt \right| \leq \left( \int_0^T |f_1(t)|^2 dt \right)^{1/2} \left( \int_0^T |f_2'(t)|^2 \rho^2(t) dt \right)^{1/2}. \quad (2.23)$$

Par la proposition 2.4.1, les intégrales sur le côté droit de (2.23) sont uniformément bornés en  $T$ , et de (2.22) nous obtenons

$$\left| \int_{-T}^T (P(T) - P(x)) [f_1 \overline{g_2} - g_1 \overline{f_2}] dx \right| < c,$$

divisons les deux parties par  $P(T)$  et faisant tendre  $T$  vers  $+\infty$  (donc  $P(T) \rightarrow +\infty$ ).

On obtient :

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left| \int_{-T}^T \left(1 - \frac{P(|x|)}{P(T)}\right) (f_1 \overline{g_2} - g_1 \overline{f_2}) dx \right| = 0. \quad (2.24)$$

Maintenant, on doit montrer que

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left| \int_{-T}^T (f_1 \overline{g_2} - g_1 \overline{f_2}) dx \right| = 0. \quad (2.25)$$

Pour finir cela on fixe  $\epsilon > 0$ . Puisque  $f_i, g_i \in L^2(\mathbb{R})$ ,

$$\int_{|x| \geq \omega} (|f_1| \cdot |g_2| + |g_1| \cdot |f_2|) dx < \epsilon$$

pour tout  $\omega$  assez grand. Alors, pour tout  $T \geq \omega$ , nous avons :

$$\left| \int_{-\omega}^{\omega} \left(1 - \frac{P(|x|)}{P(T)}\right) (f_1 \bar{g}_2 - g_1 \bar{f}_2) dx \right| \leq \left| \int_{-T}^T \left(1 - \frac{P(|x|)}{P(T)}\right) (f_1 \bar{g}_2 - g_1 \bar{f}_2) dx \right| + \epsilon.$$

Faisant tendre  $T$  vers  $+\infty$  et en utilisant (2.24), on obtient

$$\left| \int_{-\omega}^{\omega} (f_1 \bar{g}_2 - g_1 \bar{f}_2) dx \right| \leq \epsilon,$$

ce qui implique (2.25) par suit le théorème 2.4.1 est prouvé. ■

**Exemple 2.4.1.** Soit  $V(x) = a(1+|x|)^\alpha$ . Alors la condition du théorème est satisfaite quand  $a \geq 0$  et  $\alpha$  est un nombre réel arbitraire, aussi bien que quand  $a < 0$  et  $\alpha > 2$ . Cependant, Si  $a < 0$  et  $\alpha > 2$ , alors  $H_0$  n'est pas essentiellement auto-adjoint.

**Remarque 2.4.3.** Dans le cas où la variété  $M = \mathbb{R}^n$  avec sa métrique standard :

*T. Carleman [19] en 1934 a montré que si la fonction  $V$  est localement bornée et globalement minorée, alors l'opérateur de Schrödinger est essentiellement auto-adjoint.*

*En 1972, T. Kato [20] a montré que l'on pouvait remplacer dans l'énoncé de Carleman l'hypothèse  $V \in L^\infty_{loc}(M)$  par  $V \in L^2_{loc}(M)$ .*

*En 1994, I. Olenik [10] [11] [12] donne un énoncé très générale concernant des variétés riemanniennes complètes connexes quelconques avec des hypothèses plus complexes sur la fonction  $V$ .*

## 2.4.2 Discretion du Spectre de l'opérateur de Schrödinger

Supposons  $V(x) \in L^\infty_{loc}(\mathbb{R})$  vérifie les conditions du théorème 2.4.1; et soit  $H$  l'extension adjointe de  $H_0$ , la question de la discretion du spectre de  $H$  se pose naturellement à ce niveau et on a le théorème suivant :

**Théorème 2.4.2.** *V une fonction de  $L_{loc}^\infty(\mathbb{R})$  telle que  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = +\infty$ . Alors le spectre  $\sigma(H)$  de l'opérateur  $H$  est discret, i.e. il existe un système orthonormé  $y_k$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , des fonctions propres dans  $L^2(\mathbb{R})$ , à valeurs propres de multiplicités finies s'accumulant en  $+\infty$  i.e.  $\lambda_k \rightarrow \infty$  quand  $k \rightarrow \infty$  :*

$$\inf_{x \in \mathbb{R}} V(x) \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_k \leq \dots$$

**Preuve :**

Soit  $V(x) \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R})$  de plus on suppose (sans perte de généralité) que  $V(x) \geq 1$ . Alors, on a :

$$\langle Hy, y \rangle \geq \langle y, y \rangle, \quad \forall y \in D(H) \quad (2.26)$$

ce qui implique que  $H$  est inversible d'inverse borné  $H^{-1}$ . Le résultat du théorème précédent est équivalent à la compacité de  $H^{-1}$ . Il convient beaucoup plus de considérer ici l'opérateur  $H^{-\frac{1}{2}}$  notons qu'il est compact si et seulement si  $H^{-1}$  est compact, ou de façon équivalente

$$M = \{y : y \in D(H), \langle Hy, y \rangle \leq 1\}$$

est relativement compact dans  $L^2(\mathbb{R})$  (c'est-à-dire sa fermeture est compacte).

Introduisant un autre ensemble

$$M_N = \{y : y \in M; y(x) = 0 \text{ si } |x| \geq N\},$$

notons que si  $y \in M_N$ , alors l'intégration par partie donne :

$$\langle Hy, y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (|y'(x)|^2 + V(x)|y(x)|^2) dx. \quad (2.27)$$

Puisque  $H$  est la fermeture de  $H_0$  qui est défini sur l'ensemble des fonctions de classe  $C^\infty$  à support compact, la relation (2.27) peut être tenue pour tout  $y \in D(H)$ .

Soit  $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  tel que  $0 \leq \phi(x) \leq 1$ ,

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } |x| \leq 1/2 \\ 0 & \text{si } |x| \geq 1 \end{cases} \quad \text{et } |\phi'(x)| \leq B.$$

Si  $y \in M$  et  $N \geq 2B$ , alors  $\phi(\frac{x}{N})y(x) \in 2M_N$  où

$$2M_N = \{y : y(x) = 2z(x), z \in M_N\}$$

en effet, on pose

$$z_N(x) = \phi\left(\frac{x}{N}\right)y(x)$$

et en utilisant (2.27), on obtient :

$$\begin{aligned} \langle Hz_n, z_n \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \left| \frac{1}{N} \phi'\left(\frac{x}{N}\right)y(x) + \phi\left(\frac{x}{N}\right)y'(x) \right|^2 + V(x) \left| \phi\left(\frac{x}{N}\right)y(x) \right|^2 \right] dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{N^2} \phi'^2\left(\frac{x}{N}\right) |y(x)|^2 + \phi^2\left(\frac{x}{N}\right) |y'(x)|^2 + \frac{2}{N} \phi\left(\frac{x}{N}\right) \phi'\left(\frac{x}{N}\right) \operatorname{Re} \left( \overline{y(x)} y'(x) \right) \right] dx \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} V(x) \phi^2\left(\frac{x}{N}\right) |y(x)|^2 dx \end{aligned}$$

estimons séparément les termes sous l'intégrale comme suit :

$$\frac{1}{N^2} \phi'^2\left(\frac{x}{N}\right) |y(x)|^2 \leq \frac{B^2}{N^2} |y(x)|^2 \leq \frac{1}{4} |y(x)|^2 \leq \frac{1}{4} V(x) |y(x)|^2;$$

$$\phi^2\left(\frac{x}{N}\right) |y'(x)|^2 \leq |y'(x)|^2;$$

$$\begin{aligned} \frac{2}{N} \phi\left(\frac{x}{N}\right) \phi'\left(\frac{x}{N}\right) \operatorname{Re} \left( \overline{y(x)} y'(x) \right) &\leq \frac{B}{N} (|y(x)|^2 + |y'(x)|^2) \\ &\leq \frac{1}{2} (V(x) |y(x)|^2 + |y'(x)|^2); \end{aligned}$$

$$V(x) \phi^2\left(\frac{x}{N}\right) |y(x)|^2 \leq V(x) |y(x)|^2.$$

En intégrant ces estimations, on obtient

$$\langle Hz_n, z_n \rangle \leq 2.$$

Nous notons en outre que si  $y \in M$  alors,

$$\langle Hz_n, z_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left| y(x) - \phi\left(\frac{x}{N}\right)y(x) \right|^2 dx \leq \int_{|x| \leq N/2} |y(x)|^2 dx \leq \left( \min_{|x| \geq N/2} V(x) \right)^{-1}$$

puisque

$$\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) |y(x)|^2 dx \leq \langle Hy, y \rangle \leq 1, \quad \forall y \in M$$

L'hypothèse  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = +\infty$  implique que,  $\forall \epsilon > 0$ , il existe  $N > 0$  tel que  $M$  est contenu dans  $\epsilon$ -voisinage de  $2M_N$ . il suffit de vérifier la compacité de  $M_N$ .

En effet, nous devons montrer qu'on a toujours  $M_N$  précompact dans l'espace des fonctions continues  $C[-N, N]$  (il est compacte au sens de la convergence uniforme). Pour faire ça, utilisant le théorème d'*Ascoli-Arzela*. Vérifions tout d'abord l'équicontinuité de  $M_N$ . Cela découle du fait que  $y \in M_n$  (en utilisant l'inégalité de *Cauchy-Bunyakovskii-Schwarz*) ;

$$|y(x_2) - y(x_1)| = \left| \int_{x_1}^{x_2} y'(t) dt \right| \leq \sqrt{|x_2 - x_1|} \left( \int_{x_1}^{x_2} |y'(x)|^2 dt \right)^{1/2} \leq \sqrt{|x_2 - x_1|} \quad (2.28)$$

Maintenant la relation (2.28) implique que :

$$|y(x)| \leq |y(t)| + (2N)^{1/2}, \quad \forall x, t \in [-N, N],$$

on intègre la dernière inégalité par rapport à  $t$ ,  $\forall t \in [-N, N]$  et en utilisant l'inégalité de *Cauchy-Schwarz*, on obtient la bornitude de  $M_N$  dans  $C([-N, N])$ . D'où la preuve du théorème. ■

**Corollaire 2.4.1.**  $\sigma(H)$  est discret si et seulement si on a la condition suivante :

$$\int_r^{r+1} V(x) dx \rightarrow +\infty \text{ quand } r \rightarrow +\infty \quad (2.29)$$

**Preuve :**

Si  $\lim_{r \rightarrow +\infty} \int_r^{r+1} V(x) dx = +\infty$ , alors :

$$\begin{aligned} \left| \int_r^{r+1} V(x) dx \right| &\leq \int_r^{r+1} |V(x)| dx \\ &\leq \sup_{r < x < r+1} |V(x)| \int_r^{r+1} dx \\ &\leq \sup_{[r, r+1]} |V(x)| \end{aligned}$$

donc  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = +\infty$ , d'où  $\sigma(H)$  est discret d'après le théorème 2.4.2.

Inversement : Si  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = +\infty$  alors nécessairement que  $\int_a^{+\infty} V(x) dx$  est divergente et donc  $\int_r^{r+1} V(x) dx$  tend vers  $+\infty$  quand  $r \rightarrow +\infty$ . ■

**Remarque 2.4.4.** *Hormis le fait que le spectre est réel, que savons nous de plus ? En 1934 K. Friedrichs a montré que dans le cas où la variété  $M = \mathbb{R}^n$  avec sa métrique standard, si la fonction  $V$  est confinante, i.e.  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = +\infty$ , alors le spectre de l'opérateur de Schrödinger  $H$  est constitué d'une suite de valeurs propres de multiplicités finies s'accumulant en  $+\infty$  :*

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_k \leq \dots$$

*Dans le contexte d'une variété riemannienne compacte avec un laplacien libre ( $V \equiv 0$ ), nous savons aussi [14] que le spectre de l'opérateur  $-\Delta_g$  est constitué d'une suite de valeurs propres positives, de multiplicités finies, et s'accumulant en  $+\infty$*

$$0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_k \leq \dots .$$

*Un des théorèmes concernant le spectre de l'opérateur de Schrödinger est celui de Kondratiev et Shubin [22], [23] qui donnent un énoncé assez technique sur les variétés à géométrie bornée.*

## 2.5 Valeurs propres négatives

Dans cette section, nous montrons que si la partie négative du potentiel  $V(x)$  de l'opérateur de Schrödinger s'annule assez rapidement quand  $|x| \rightarrow +\infty$ , l'opérateur dispose d'un nombre fini de valeurs propres négatives.

### 2.5.1 Cas d'un opérateur défini sur un demi-axe

**Condition de Dirichlet :**

Considérons l'opérateur

$$Hy = -y'' + V(x)y \tag{2.30}$$

défini sur le demi-axe réel  $\mathbb{R}^+ = \{x/x \geq 0\}$  avec la condition limite simple

$$y(0) = 0. \tag{2.31}$$

Si  $V$  satisfait aux conditions du théorème 2.4.1,  $H$  est un opérateur auto-adjoint dans  $L^2(\mathbb{R}^+)$ . Plus précisément, à propos du théorème 2.4.1 l'opérateur (2.30) est

essentiellement auto-adjoint sur le sous-espace constitué pour tout  $y \in C^\infty(\mathbb{R}^+)$  de telle sorte que  $y(0) = 0$  et  $y(x) = 0$  pour tout  $x$  suffisamment grand. Nous représentons le potentiel  $V(x)$  comme la somme :

$$V(x) = V_+(x) + V_-(x)$$

où  $V_-(x) = \min(V(x), 0)$ ,  $V_+(x) = \max(V(x), 0)$ .

En particulier, supposons que  $V \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R}^+)$  est borné inférieurement c'est-à-dire que :

$$V(x) \geq -C_0, \quad x \in \mathbb{R}^+. \quad (2.32)$$

Notre but est de trouver les valeurs propres réelles de  $H$  avec les fonctions propres de  $L^2(\mathbb{R}^+)$  correspondentes telle que

$$Hy = \lambda y.$$

Si  $V$  est intégrable dans  $\mathbb{R}^+$ , alors pour  $\lambda > 0$ ,  $\lambda = k^2$ , où  $k$  est réel, nous savons que l'asymptotique de  $y(x)$  quand  $x \rightarrow +\infty$  est  $C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$  où  $C_1 = C_2 = 0$  seulement lorsque  $y = 0$ . D'où l'équation  $Hy = \lambda y$  pour  $\lambda > 0$  n'a pas de solutions non nulles dans  $L^2(\mathbb{R})$ . Au contraire, pour  $\lambda < 0$  et  $V$  intégrable chaque fonction propre généralisée est asymptotique à  $e^{-kx}$ , où  $k > 0$ , et ainsi appartient à  $L^2(\mathbb{R})$ . Ce qui nous intéresse, donc, est le nombre de valeurs propres négatives de  $H$ .

Supposons pour simplifier l'étude que la fonction  $V_-(x)$  est continue et vérifiée

$$\lim_{x \rightarrow \infty} V_-(x) = 0. \quad (2.33)$$

Par conséquent, il est facile de voir que l'ensemble du spectre de  $H$  sur  $(-\infty, 0)$  est constitué de valeurs propres isolées de multiplicité finie.

Notons par  $N_-(H)$  le nombre des valeurs propres négatives de  $H$  (multiplicités comptés).

Nous pouvons maintenant énoncer le théorème principal.

**Théorème 2.5.1.** *Soit  $V$  satisfait (2.32) et supposons que  $V_-$  est continue sur  $[0, \infty)$  alors :*

$$N_-(H) \leq \int_0^\infty x |V_-(x)| dx. \quad (2.34)$$

**Preuve :**

Tout d'abord, sans perte de généralité, supposons que  $V_+(x) = 0$  et, par conséquent,  $V(x) = V_-(x)$ . En outre, nous supposons que  $V(x) \not\equiv 0$ , car le cas où  $V \equiv 0$  est trivial. Nous introduisons le paramètre  $\tau$  tel que  $0 \leq \tau \leq 1$  et considérons la famille d'opérateurs

$$H_\tau y = -y'' + \tau V(x)y.$$

Il est clair de (2.33) que la partie négative du spectre de  $H_\tau$  pour tout  $\tau$  se compose de valeurs propres simples discrètes qui nous énumérons dans l'ordre croissant :

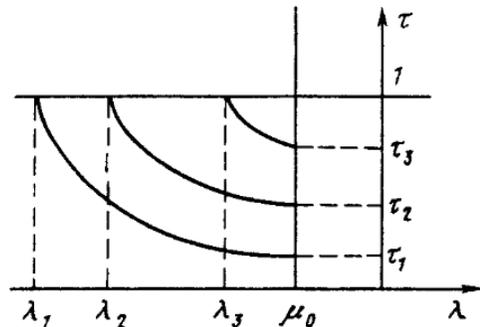
$$\lambda_1(\tau) < \lambda_2(\tau) < \dots < \lambda_n(\tau) < \dots$$

Il résulte d'après la théorie des perturbations des valeurs propres [3] que  $\lambda_n(\tau)$  est une fonction analytique de  $\tau$ , donc

$$\lambda'_n(\tau) = \int_0^\infty V(x)|f_n(\tau, x)|^2 dx < 0,$$

où  $f_n(\tau, x)$  est la fonction propre normalisée associée à la valeur propre  $\lambda_n(\tau)$  de  $H_\tau$ .

Bien sûr,  $\lambda_n(\tau)$  n'est pas définie sur l'ensemble de  $(0, 1]$ , mais elle est définie seulement sur un sous-intervalle semi-ouvert  $(\tau_0(n), 1] \subset [0, 1]$ , en passant dans la partie positive du spectre pour  $\tau = \tau_0(n)$ . Pour  $\mu_0 < 0$  fixé, on considère le nombre  $N_{\mu_0}$  de valeurs propres de  $H$  qui sont inférieures à  $\mu_0$  (*i.e.*  $N_{\mu_0} \in (-\infty, \mu_0)$ ). Il est clair que  $N_{\mu_0} \rightarrow N_-(H)$  quand  $\mu_0 \rightarrow 0$ . soit  $\tau$  diminuer de 1 à 0, nous voyons que, pour tout  $n$ , il existe  $\tau_n$  telle que  $\lambda_n(\tau_n) = \mu_0$  pourvu que  $\lambda_n(1) < \mu_0$  (et unique dans ce cas), comme illustré dans la figure suivante



(les courbes inclinées sont les graphes des fonctions  $\lambda_n(\tau_n)$ ). On voit que les valeurs propres  $\lambda_n = \lambda_n(1)$  tel que  $\lambda_n < \mu_0$  sont en correspondance bijectives avec le nombres  $\tau$  tel que  $0 < \tau \leq 1$  et il existe une fonction non nulle  $y(x) \in L^2(\mathbb{R}^+)$  satisfaisant

$$-y'' - \mu_0 y = -\tau V(x)y \quad (2.35)$$

avec la condition aux limites (2.31).

Soit  $L$  l'opérateur différentiel  $-\frac{d^2}{dx^2} - \mu_0$  dans  $L_2(\mathbb{R}^+)$ , avec condition aux limites (2.31). puisque  $\mu_0 < 0$ , alors  $L$  est inversible et  $L^{-1}$  est exprimée sous la forme :

$$(L^{-1}f)(x) = \int_0^\infty K(x, \xi)f(\xi)d\xi,$$

où  $K(x, \xi)$  peut être trouvé, en déterminant  $y = L^{-1}f$  à partir de l'équation  $-y'' - \mu_0 y = f$  par la méthode de la variation des constantes, en tenant compte de la condition au limite (2.31) et l'hypothèse  $y \in L^2(\mathbb{R}^+)$ , ou du fait que  $K(x, \xi)$  doit vérifier l'équation suivante :

$$-\frac{\delta^2(K(x, \xi))}{\delta x^2} - \mu_0 K(x, \xi) = \delta(x - \xi) \quad (2.36)$$

avec la condition limite  $K(0, \xi) = 0$  et définir un opérateur continu dans  $L^2(\mathbb{R})$  (ce qui nécessite des solutions rejet de l'équation (2.36) qui augmentent de manière exponentielle quand  $x \rightarrow +\infty$ ). On obtient alors l'expression suivante pour  $K(x, \xi)$

$$K(x, \xi) = \theta(\xi - x) \frac{\sinh(\sqrt{-\mu_0}x)}{\sqrt{-\mu_0}} e^{-\sqrt{-\mu_0}\xi} + \theta(x - \xi) \frac{\sinh(\sqrt{-\mu_0}x)}{\sqrt{-\mu_0}} e^{-\sqrt{-\mu_0}x},$$

où

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases}$$

Nous pouvons maintenant réécrire (2.35) sous la forme

$$y = \tau L^{-1}[(-V(x))y].$$

Par conséquent, les  $\tau_n$  sont les inverses des valeurs propres de l'opérateur intégral  $K_1$  avec le noyau

$$K_1(x, \xi) = -K(x, \xi)V(\xi).$$

Pour terminer la preuve du théorème nous montrons le lemme suivant :

**Lemme 2.5.1.** *Si  $V$  est intégrable sur  $[0, \infty)$ , alors l'opérateur  $K_1$  n'a pas plus qu'un ensemble dénombrable de valeurs propres non nulles  $\lambda_k, k=1, 2, \dots$ . D'entre eux sont positives et simples et*

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k = \int_0^{\infty} K_1(x, x) dx.$$

On utilise le lemme pour terminer la preuve du théorème 2.5.1, pour  $N_{\mu_0}$  l'estimation suivante est valable :

$$\begin{aligned} N_{\mu_0} &\leq \sum_{\tau_k \leq 1} \frac{1}{\tau_k} = \sum_{\lambda_k \geq 1} \lambda_k \leq \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k = \int_0^{\infty} \frac{\sinh \sqrt{-\mu_0} x}{\sqrt{-\mu_0}} e^{-\sqrt{-\mu_0} x} |V(x)| dx \\ &= \int_0^{\infty} \frac{1 - e^{-2\sqrt{-\mu_0} x}}{2\sqrt{-\mu_0}} |V(x)| dx \leq \int_0^{\infty} x |V(x)| dx. \end{aligned}$$

(Nous avons utilisé l'inégalité  $1 - e^{-y} \leq y$  pour  $y > 0$ ). Cela implique immédiatement (2.34)

■

**Preuve du lemme :**

Désignons par  $K$  l'opérateur de  $L^2(\mathbb{R}^+)$  avec un noyau  $K(x, \xi)$  (c'est  $L^{-1}$ ) et par  $W$  l'opérateur de multiplication par  $|V(x)|$ . Nous avons  $K_1 = KW$ . Considérons maintenant l'opérateur

$$K_2 = W^{1/2} K W^{1/2}$$

dont le noyau  $K_2(x, \xi)$  est de la forme

$$K_2(x, \xi) = \sqrt{|V(x)|} K(x, \xi) |V(\xi)|^{1/2}$$

ce qui implique évidemment que

$$\int_0^{\infty} K_1(x, x) dx = \int_0^{\infty} K_2(x, x) dx. \quad (2.37)$$

Soit  $\lambda$  un nombre complexe non nul,  $H_{\lambda}(K_1)$ ,  $H_{\lambda}(K_2)$  sont des sous-espaces propres sur  $L^2(\mathbb{R}^+)$  des opérateurs  $K_1$ ,  $K_2$  respectivement correspondant à la valeur propre  $\lambda$ . Il peut être directement vérifiée que si  $f \in H_{\lambda}(K_1)$  alors  $W^{1/2} f \in H_{\lambda}(K_2)$ , d'où  $W^{1/2}$  définit une application

$$W^{1/2} : H_{\lambda}(K_1) \rightarrow H_{\lambda}(K_2). \quad (2.38)$$

Cette application est en fait un isomorphisme. En effet, si  $f \in H_\lambda(K_1)$  et  $W^{1/2}f = 0$ , alors  $Wf = 0$ , ce qui signifie que  $K_1f = KWf = 0$ , ce qui contredit l'hypothèse  $\lambda \neq 0$ , par conséquent, l'application (2.38) est un isomorphisme. Ensuite, si  $g \in H_\lambda(K_2)$ , puit  $W^{1/2}KW^{1/2}g = \lambda g$ , et mettre  $f = 1/\lambda KW^{1/2}g$  on trouve immédiatement que  $W^{1/2}f = g$  et  $f \in H_\lambda(K_1)$ , d'où (2.38) est surjectif.

Nous voyons maintenant que toute les valeurs propres de l'opérateur  $K_1$  sont non négatives puisque  $K_2$  est non négatif. puis l'équation  $KWf = \lambda f$  est équivalente à l'équation  $\lambda Lf = Wf$ , nous voyons que toutes les valeurs propres sont simples. En outre, étant donné que  $K_2(x, \xi) \geq 0$  est continu,  $K_2$  est un opérateur nucléaire et sa trace donné par la formule

$$tr K_2 = tr K_1 = \int_0^\infty K_2(x, x)dx = \int_0^\infty K_1(x, x)dx, \quad (2.39)$$

puisque l'opérateur  $K_2$  est positif et a le noyau continu  $K_2(x, \xi)$ , cela découle la convergence de l'intégrale sur le côté droit de (2.39),

■

**Remarque 2.5.1.** *L'estimation (2.34) est également valable dans le cas d'un potentiel borné discontinu, où elle peut être dérivée à partir des potentiels continus par passage à la limite.*

### Condition de Neumann :

Tout d'abord, nous montrons par un contre-exemple que l'inégalité (2.34) pas vérifié dans le cas d'un opérateur sur le demi-axe avec la condition Neumann  $y'(0) = 0$ , et aussi dans le cas sur l'axe général.

**Exemple 2.5.1.** *Soit*

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| \geq \alpha \\ -\epsilon & \text{si } |x| < \alpha \end{cases}, \text{ avec } \epsilon > 0$$

*Nous montrons que l'opérateur  $H$  avec la condition Neumann a une valeur propre négative pour tous  $\epsilon > 0$ ,  $\alpha > 0$ , ce qui implique évidemment que l'inégalité (2.34)*

est impossible. Pour étudier l'équation correspondant à la fonction propre

$$\begin{aligned} -y'' - \epsilon y &= \lambda y, & |x| < \alpha, \\ -y'' &= \lambda y, & |x| \geq \alpha. \end{aligned}$$

où  $y$  et  $y'$  doit être continue au point  $x = \pm\alpha$ . Clairement, nous pouvons supposer que  $-\epsilon \leq \lambda < 0$  (l'opérateur  $H$  correspondant satisfait  $H \geq -\epsilon I$ , donc il n'y a pas de spectre en  $(-\infty, -\epsilon)$ ). Nous constatons maintenant un point  $\lambda$  du spectre discret tel que  $-\epsilon < \lambda < 0$  (en fait, il est facile de vérifier que  $\lambda = -\epsilon$  n'est pas une valeur propre, mais nous n'aurons pas besoin d'elle). Notons que puisque le potentiel  $V$  est une fonction paire,  $y(-x)$  ainsi que  $y(x)$  sont des fonctions propres. Mais si  $y$  est valeur réelle (sans perte de généralité), alors puisque la valeur propre est simple, nous devons avoir  $y(-x) = \pm y(x)$  à savoir,  $y(x)$  est pair ou impair.

Si  $y(x)$  est impair, alors  $y(0) = 0$ , et  $y(x)$  sur  $[0, +\infty)$  est une fonction propre du problème (2.30)-(2.31) avec  $\lambda$  négative, ce qui est impossible pour  $\epsilon > 0$  assez petits. Ainsi, il suffit de considérer le cas  $y$  est paire. Alors  $y'(0) = 0$  et

$$\begin{aligned} y(x) &= C_1 \cos \sqrt{\epsilon + \lambda} x, & |x| < \alpha, \\ y(x) &= C_2 e^{-\sqrt{-\lambda}|x|}, & |x| \geq \alpha. \end{aligned}$$

Les conditions correspondant à  $x = \pm\alpha$  ont la forme suivante :

$$\begin{cases} C_1 \cos \sqrt{\epsilon + \lambda} \alpha - C_2 e^{-\sqrt{-\lambda} \alpha} &= 0, \\ -C_1 \sqrt{\epsilon + \lambda} \sin \sqrt{\epsilon + \lambda} \alpha + C_2 \sqrt{-\lambda} e^{-\sqrt{-\lambda} \alpha} &= 0. \end{cases}$$

Le fait que  $\lambda$  est une valeur propre est équivalent à l'existence d'une solution non triviale  $(C_1, C_2)$  de ce système d'équations linéaires. Mais son déterminant est égal à

$$\begin{vmatrix} \cos \sqrt{\epsilon + \lambda} \alpha & -e^{-\sqrt{-\lambda} \alpha} \\ -\sqrt{\epsilon + \lambda} \sin \sqrt{\epsilon + \lambda} \alpha & \sqrt{-\lambda} e^{-\sqrt{-\lambda} \alpha} \end{vmatrix} = e^{-\sqrt{-\lambda} \alpha} [\sqrt{-\lambda} \cos(\sqrt{\epsilon + \lambda} \alpha) - \sqrt{\epsilon + \lambda} \sin(\sqrt{\epsilon + \lambda} \alpha)].$$

L'assimilant à zéro, on obtient l'équation

$$\tan[\alpha \sqrt{\epsilon + \lambda}] = \sqrt{\frac{-\lambda}{\epsilon + \lambda}},$$

qui a toujours une solution  $\lambda \in (-\epsilon, 0)$  comme vu d'une analyse élémentaire des graphes de la gauche et de droite côtés.

Le même exemple montre que l'estimation de type (2.34) ne peut pas tenir dans  $[0, \infty)$  si la condition de Dirichlet  $y(0) = 0$  est remplacée par la condition de Neumann :  $y'(0) = 0$ . Dans les paragraphes qui suivent, nous verrons comment l'estimation (2.34) devrait être modifiée pour tenir compte à la fois de la condition de Neumann et les opérateurs sur l'axe réel tout entier.

Maintenant, considérons l'opérateur  $H$  défini sur  $\mathbb{R}^+$  par :

$$Hy = -y'' + V(x)y,$$

avec la condition de Neumann

$$y'(0) = 0, \tag{2.40}$$

et soit l'opérateur  $H_N$  de  $L_2(\mathbb{R}^+)$  généré par l'expression différentielle  $-y'' + V(x)y$  et la condition (2.40). Désigne par  $N_-(H_N)$  le nombre des valeurs propres négatives de  $H_N$ .

**Théorème 2.5.2.** *Soit  $V(x) \geq -C_0$ ,  $x \in \mathbb{R}^+$ , et supposons que la fonction  $V_-(x)$  est continue sur  $[0, +\infty)$ . Alors, nous avons l'estimation*

$$N_-(H_N) \leq 1 + \int_0^\infty x|V_-(x)|dx. \tag{2.41}$$

**Preuve :**

D'après le théorème 2.5.1, il suffit de démontrer que

$$N_-(H_N) \leq 1 + N_-(H), \tag{**}$$

où  $H$  est un opérateur de la forme (2.30) avec la condition de Dirichlet (2.31). plus généralement, on a l'inégalité suivante :

$$N(\lambda; H_N) \leq 1 + N(\lambda; H), \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}. \tag{2.42}$$

On sait que  $H$  et  $H_N$  sont des opérateurs essentiellement auto-adjoints sur  $D(H)$  et  $D(H_N)$  respectivement tels que :

$$\begin{aligned} D &= \{u \in C^\infty(\mathbb{R}^+)/u(0) = 0, \text{ et } \exists R > 0 \text{ tel que } u(x) = 0, \quad \forall x > R\}, \\ D_N &= \{u \in C^\infty(\mathbb{R}^+)/u'(0) = 0, \text{ et } \exists R > 0 \text{ tel que } u(x) = 0, \quad \forall x > R\}. \end{aligned}$$

On pose

$$N(\lambda - 0, H_N) = \sup\{\dim L \text{ tel que } L \subset D_N, \langle Hu, u \rangle < \lambda \langle u, u \rangle, u \in L \setminus \{0\}\}. \quad (2.43)$$

et

$$N(\lambda - 0, H) = \sup\{\dim \bar{L} \text{ tel que } \bar{L} \subset D, \langle Hu, u \rangle < \lambda \langle u, u \rangle, u \in \bar{L} \setminus \{0\}\}. \quad (2.44)$$

Par conséquent, il suffit de montrer que pour toute  $L \subset D_N$  telle que

$$\langle Hu, u \rangle < \lambda \langle u, u \rangle, u \in L \setminus \{0\},$$

il existe  $\bar{L} \subset D$  de telle sorte que :

$$\langle Hu, u \rangle < \lambda \langle u, u \rangle, u \in \bar{L} \setminus \{0\},$$

et

$$\dim L \leq 1 + \dim \bar{L}.$$

Mais cela peut être établi

$$\bar{L} = \{u : u \in L, u(0) = 0\}.$$

Puisque  $\bar{L} \subset L$  et  $\dim L/\bar{L} \leq 1$ ,  $\bar{L}$  répond évidemment à toutes les exigences nécessaires. ■

**Remarque 2.5.2.** *l'inégalité*

$$N(\lambda; H) \leq 1 + N(\lambda; H_N)$$

*est prouvé de la même façon que (2.42). Cependant, une inégalité plus forte est vraie :*

$$N(\lambda; H) \leq N(\lambda; H_N) \quad (2.45)$$

Pour le montrer, on utilise les notations introduites dans la preuve du théorème 2.5.2.

Soit  $\mathcal{H}_N$  le complété  $D_N$  (ou  $D_{H_N}$ ) par rapport à la norme  $\|\cdot\|_H$  défini par

$$\|\cdot\|_H^2 = \langle Hu, u \rangle + C \langle u, u \rangle \quad (2.46)$$

où  $C > 0$  est suffisamment grand. Alors

$$N(\lambda - 0, H_N) = \sup\{\dim L \text{ tel que } L \subset \mathcal{H}_N, \langle Hu, u \rangle < \lambda \langle u, u \rangle, u \in L \setminus \{0\}\}$$

où  $H(u, u) = \|u\|^2 - C\|u\|^2$  est l'extension par la continuité de la forme  $H(u, u) = \langle Hu, u \rangle$  à  $\mathcal{H}_N$ . Nous comparons cette expression avec celle de  $N(\lambda - 0, H)$  donnée par (2.44). L'inégalité (2.45) sera prouvée si nous constatons que  $D \subset H_N$ . Il est facile de vérifier encore un cas plus général : si  $u \in C^\infty([0, +\infty))$  à support compact, *i.e.*,  $u = 0$  pour  $x > R$  pour certains  $R > 0$ , alors  $u \in \mathcal{H}_N$  (Cela signifie que, si nous passons de  $D_N$  à  $\mathcal{H}_N$ , alors la condition limite (2.40) disparaît). Pour montrer ça, nous réécrivons la norme (2.46) pour  $u \in D_N$  comme

$$\|u\|_H^2 = \int_0^\infty \left[ |u'(x)|^2 + (C + V(x)) |u(x)|^2 \right] dx \quad (2.47)$$

(ceci résulte de l'intégration par partie). Maintenant, pour une fonction  $u \in C^\infty([0, +\infty))$  à support compact nous construisons l'approximation suivante : soit  $w_\epsilon \in C^\infty(\mathbb{R}^+)$  tel que  $w_\epsilon(x) = 0$  pour  $x < \epsilon$  et  $x > R$  (ici  $R$  est fixe et ne dépend pas de  $\epsilon > 0$ ) et  $\|w_\epsilon - u'\| \rightarrow 0$  quand  $\epsilon \rightarrow +0$ , supposons maintenant

$$u_\epsilon = - \int_x^\infty w_\epsilon(t) dt - \int_x^R w_\epsilon(t) dt$$

(d'où  $u'_\epsilon = w_\epsilon$ ). En utilisant l'inégalité de *Cauchy-Schwarz-Bunyakovskii* il peut être facilement vérifié que  $\|u_\epsilon - u\| \rightarrow 0$  quand  $\epsilon \rightarrow +0$ . Mais de cela, et le fait que  $\|u'_\epsilon - w_\epsilon\|_H \rightarrow 0$  avec la forme explicite (2.47) de la norme  $\|\cdot\|$ , il en résulte que  $\|u_\epsilon - u\| \rightarrow 0$  quand  $\epsilon \rightarrow +0$  (rappelons que  $V$  est supposé être borné dans chaque segment fini), selon les besoins. La relation (2.45) est prouvée.

■

**Remarque 2.5.3.** *Considérons les valeurs propres de l'opérateur  $H$  (avec la condition de Dirichlet)*

$$\lambda_1(H) \leq \lambda_2(H) \leq \lambda_3(H) \leq \dots,$$

*compris, éventuellement, dans le sens généralisé et les valeurs propres*

$$\lambda_1(H_N) \leq \lambda_2(H_N) \leq \lambda_3(H_N) \leq \dots,$$

*du même opérateur avec la condition de Neumann. Alors (2.42), (2.45) tenir (pour toute  $\lambda$ ) si et seulement si*

$$\lambda_1(H_N) \leq \lambda_1(H) \leq \lambda_2(H_N) \leq \lambda_2(H) \leq \lambda_3(H_N) \leq \lambda_3(H) \leq \dots$$

*Notons qu'à partir de ça, il en résulte que, si  $H$  ou  $H_N$  a un spectre discret dans le demi intervalle  $(-\infty, A]$ , alors il en est de l'autre. Dans ce cas, tous les inégalités dans la formule précédente sont strictes.*

## 2.5.2 Cas d'un opérateur défini sur $\mathbb{R}$

**Théorème 2.5.3.** *Soit  $H = -y'' + V(x)y$ ,  $\forall x \in \mathbb{R}$  et supposons que le potentiel  $V$  est localement borné inférieurement ( $V \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R})$ ,  $V(x) \geq -C_0$ ), et a une partie négative  $V_-(x)$  continue. Soit  $N_-(H)$  le nombre de ses valeurs propres négatives. Alors*

$$N_-(H) \leq 1 + \int_{-\infty}^{\infty} |x| |V_-(x)| dx. \quad (2.48)$$

**Preuve :**

Considérons deux opérateurs  $H_+$  et  $H_-$  définis par (2.30) dans les demies intervalles  $[0, +\infty)$  et  $(-\infty, 0]$ , respectivement, avec la condition de Dirichlet  $y(0) = 0$  dans les deux cas. Soit  $N_\pm(\lambda)$  la fonction de distribution du spectre de  $H_\pm$ , et  $N(\lambda)$  la fonction de distribution du spectre de  $H$ . On doit montrer que

$$N(\lambda) \leq 1 + N_+(\lambda) + N_-(\lambda). \quad (2.49)$$

pour tout  $\lambda \in \mathbb{R}$  (en remplaçant  $\lambda = -0$  dans cette inégalité et en utilisant (2.34) nous devons évidemment obtenir l'estimation requise (2.48)).

Pour montrer (2.49), il est commode de passer aux représentations de  $N(\lambda)$  et  $N_{\pm}(\lambda)$  en ce qui concerne les formes quadratiques générées par les opérateurs  $H$  et  $H_{\pm}$ , comme est fait dans Remarque 2.5.2. Soit  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_H$  est un espace de Hilbert, qui est le complémentaire de  $D(H)$  muni par la norme suivante  $\|u\|_H^2 = \langle Hu, u \rangle + C \langle u, u \rangle$ , où  $C > 0$  suffisamment grand. Nous définissons sur  $\mathcal{H}$  la forme sesquilinéaire  $H(\cdot, \cdot)$ , l'extension continue de la forme  $H(u, v) = (Hu, v)$  pour  $u, v \in D(H)$ . De la même manière, nous introduisons les espaces  $\mathcal{H}_{\pm}$ , les complitudes de  $D(H_{\pm})$  tout en respectons la norme  $\|u\|_{H_{\pm}}^2 = \langle H_{\pm}u, u \rangle + C \langle u, u \rangle$ . Les formes  $H_{\pm}(\cdot, \cdot)$  dans  $\mathcal{H}_{\pm}$  sont les extensions continues des formes  $H_{\pm}(u, v) = (H_{\pm}u, v)$  pour  $u, v \in D(H_{\pm})$ . Il y a des plongements  $\mathcal{H}_H \subset L^2(\mathbb{R})$ ,  $\mathcal{H}_{\pm} \subset L^2(\mathbb{R}^{\pm})$ .

Pour obtenir  $\mathcal{H}$  nous pouvons compléter  $D = C_0^{\infty}(\mathbb{R})$  au lieu de  $D(H)$  (par rapport à la même norme  $\|\cdot\|_H$ ). Considérons

$$\bar{D} = \{u : u \in D, u(0) = 0\}$$

et soit  $\bar{H}$  le complémentaire de  $\bar{D}$  par rapport à la norme  $\|\cdot\|_H$ . Alors  $\bar{H}$  est un sous-espace fermé de  $\mathcal{H}$  et  $\dim \mathcal{H}/\bar{H} \leq 1$ , (car la fonction  $y \rightarrow y(0)$  est continue par rapport à  $\|\cdot\|_H$ , il est facile de déduire que  $\dim \mathcal{H}/\bar{H} = 1$ , mais nous n'ont pas besoin de cela). Il existe un isomorphisme  $\bar{H} = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-$ , qui attribue  $\{f_+, f_-\}$  pour  $f \in \bar{H}$ ,  $f_{\pm} = f|_{\mathbb{R}^{\pm}}$ . Dans ce cas, nous écrivons pour la concision  $f = f_+ + f_-$ , en gardant à l'esprit que  $f_+$  est continue au point zéro dans  $(-\infty, 0]$  et  $f_-$  continue au point zéro dans  $[0, +\infty)$ . Il peut être facilement vérifié que l'application

$$\bar{H} \rightarrow \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-, f \rightarrow \{f_+, f_-\} \quad (2.50)$$

est en effet un isomorphisme. Son injectivité est tout à fait évident, alors que pour vérifier sa surjectivité il suffit de constater, d'abord, que c'est une isométrie si la norme sur  $\mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-$  est introduite d'une manière usuelle par le produit scalaire,

$$\langle f_+ + f_-, g_+ + g_- \rangle_{\mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-} = \langle f_+, g_+ \rangle_{\mathcal{H}_+} + \langle f_-, g_- \rangle_{\mathcal{H}_-} = \langle f_+ + f_-, g_+ + g_- \rangle_{\mathcal{H}}$$

et, deuxièmement, que l'image de l'application (2.50) inclut l'ensemble des couples  $\{u_+, u_-\}$ ,  $u_{\pm} \in D_{\pm}$ , où  $D_{\pm} = \{u \in C^{\infty}(\mathbb{R}^{\pm}), u(0) = 0, u(x) = 0 \text{ pour } |x| \text{ assez grand}\}$ . Nous devons effectivement vérifier que si  $u_{\pm} \in D_{\pm}$ , alors  $u = (u_+ + u_-) \in \bar{H}$ .

Ceci est fait exactement de la même manière que la vérification du fait que  $u \in \mathcal{H}_N$  dans la preuve de l'inégalité (2.45) (Remarque 2.5.2), alors nous omettons les détails. Si  $f, g \in \overline{\mathcal{H}}$ ,  $f = f_+ + f_-$ ,  $g = g_+ + g_-$ , où  $f_+, g_+ \in \mathcal{H}_+$ ,  $f_-, g_- \in \mathcal{H}_-$ , alors  $H(f, g)$  peut être écrit sous la forme suivante :

$$H(f, g) = H_+(f_+, g_+) + H_-(f_-, g_-).$$

Nous utilisons maintenant le principe variationnel

$$N(\lambda - 0) = \sup\{\dim L \text{ tel que } L \subset D, (Hu, u) < \lambda < u, u \rangle, u \in L \setminus \{0\}\}. \quad (2.51)$$

Nous vérifions (2.49) avec  $\lambda$  remplacé par  $\lambda - 0$ . Pour cela, par (2.51), il suffit de démontrer que si un espace de dimension finie est de telle sorte que

$$(Hu, u) < \lambda < u, u \rangle, \forall u \in L \setminus \{0\},$$

alors

$$\dim L \leq 1 + N_+(\lambda - 0) + N_-(\lambda - 0).$$

Soit  $\overline{L} = L \cap \overline{D}$ , c'est-à-dire,  $\overline{L} = \{u : u \in L, u(0) = 0\}$ . Alors  $\dim L/\overline{L} \leq 1$ , donc  $\dim L \leq 1 + \dim \overline{L}$ . pour cela il suffit de montrer que

$$\dim \overline{L} \leq N_+(\lambda - 0) + N_-(\lambda - 0). \quad (2.52)$$

Considérons la projection spectrale  $E_{\lambda-0}^\pm$  des opérateurs  $H_\pm$  et les sous-espaces  $L_{\lambda-0}^\pm = E_{\lambda-0}^\pm \mathcal{H}_0$ , où  $\mathcal{H}_0 = L^2(\mathbb{R})$ . Alors  $L_{\lambda-0}^\pm \subset D(H_\pm)$  et, a fortiori,  $L_{\lambda-0}^\pm \subset \mathcal{H}_\pm$ . On peut supposer que les  $L_{\lambda-0}^\pm$  sont de dimension finie (autrement, (2.52) est évidente). Considérons maintenant les compléments orthogonaux  $M_{\lambda-0}^\pm$  de  $L_{\lambda-0}^\pm$  dans  $L^2(\mathbb{R}^\pm)$  et leurs intersections  $K_{\lambda-0}^\pm = M_{\lambda-0}^\pm \cap \overline{\mathcal{H}}_\pm$  a  $\mathcal{H}_\pm$ . Il est facile de vérifier que  $K_{\lambda-0}^\pm$  sont les compléments orthogonaux de  $L_{\lambda-0}^\pm$  dans  $\mathcal{H}_\pm$ . En outre  $H_\pm(u, u) \geq \lambda < u, u \rangle$  pour  $u \in K_{\lambda-0}^\pm$ . Par conséquent, si  $K_{\lambda-0} = K_{\lambda-0}^+ + K_{\lambda-0}^- \subset \overline{\mathcal{H}}$ , alors

$$H(u, u) \geq \lambda < u, u \rangle, u \in K_{\lambda-0}.$$

Par conséquent  $\overline{L} \cap K_{\lambda-0} = \{0\}$ . Mais à partir de ça il en résulte immédiatement que la projection orthogonale de  $\overline{L}$  sur  $L_{\lambda-0}^+ \oplus L_{\lambda-0}^- \subset \mathcal{H}$  est injective (n'a pas de noyau) et, par conséquent, (2.52) est vrai, comme l'exige.

■

# Chapitre 3

## Zéros et comportement asymptotique des fonctions propres

Ce chapitre est consacré à l'étude de comportement asymptotique et zéros des fonctions propres de l'opérateur de schrodinger et en terminons par l'étude du potentiel de diffusion sur l'axe réel.

### 3.1 Théorèmes sur les zéros des fonctions propres

Considérons l'opérateur  $H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ , où  $V$  satisfait

$$\lim_{|x| \rightarrow +\infty} V(x) = +\infty. \quad (3.1)$$

Nous voulons donner une autre preuve de la discrétisation du spectre de  $H$ , basé sur une étude des zéros des fonctions propres. Notons que nous pouvons (et nous) ne considérer que les fonctions propres réelles.

Nous commençons par le théorème de Sturm oscillation, que nous utilisons par la suite.

**Théorème 3.1.1.** *Soient  $y_1, y_2$  sont deux solutions non nulles des équations différentielles suivantes :*

$$-y_1'' + V_1 y_1 = 0, \quad -y_2'' + V_2 y_2 = 0.$$

Si  $V_1(x) \geq V_2(x)$  sur le segment  $[a, b]$  tel que  $y_1(a) = y_1(b) = 0$ , alors il existe  $x_0 \in [a, b]$  telle que  $y_2(x_0) = 0$ . En d'autres termes, entre tous deux zéros de  $y_1$  il y a un zéro de  $y_2$ . Cependant, si nous supposons en outre que  $V_1(x) > V_2(x)$  sur un sous-ensemble  $M \subset [a, b]$  de mesure de Lebesgue positive, alors le point  $x_0$  tel que  $y_2(x_0) = 0$  se trouve encore dans un intervalle ouvert  $(a, b)$  entre deux zéros de la fonction  $y_1(x)$ .

**Preuve :**

Supposons qu'il n'existe pas des zéros de  $y_1$  et  $y_1 > 0$  sur  $(a, b)$ . Alors  $y_1'(a) > 0$  et  $y_1'(b) < 0$  (si, par exemple,  $y_1'(a) = 0$ , alors  $y_1 \equiv 0$  selon le théorème d'unicité). Maintenant, supposons au contraire que sur  $[a, b]$ , il n'y a pas des zéros de  $y_2(x)$  et que  $y_2(x) > 0$  pour tout  $x \in [a, b]$ . En multipliant la première équation par  $y_2$  et la second par  $y_1$  et en intégrant sur  $[a, b]$  la différence entre les équations obtenues, on obtient

$$0 = \int_a^b (y_1 y_2'' - y_1'' y_2) dx + \int_a^b (V_1 - V_2) y_1 y_2 dx;$$

d'où

$$\begin{aligned} 0 &\geq \int_a^b (y_1 y_2'' - y_1'' y_2) dx = \int_a^b \frac{d}{dx} (y_1 y_2' - y_1' y_2) dx = \\ &= (y_1 y_2' - y_1' y_2) \Big|_a^b = y_1'(a) y_2(a) - y_1'(b) y_2(b). \end{aligned}$$

Mais les hypothèses ci-dessus impliquent que la dernière expression devrait être positive. Cette contradiction prouve la première partie du théorème.

Supposons maintenant que  $y_1(a) = y_1(b) = 0$ ,  $y_1(x) > 0$  et  $y_2(x) > 0$  pour tout  $x \in (a, b)$  et  $V_1 > V_2$  sur un sous-ensemble de mesure positive sur  $[a, b]$ . Comme ci-dessus, nous trouvons maintenant des équations que

$$y_1'(a) y_2(a) - y_1'(b) y_2(b) < 0,$$

tandis que l'inégalité inverse est évidente :

$$y_1'(a) y_2(a) - y_1'(b) y_2(b) \geq 0,$$

puisque  $y_1'(a) > 0$ ,  $y_2(a) \geq 0$ ,  $y_1'(b) < 0$  et  $y_2(b) \geq 0$ . Cette contradiction prouve la seconde partie du théorème.

■

**Proposition 3.1.1.** *Si  $y$  est une solution non nulle de l'équation différentielle  $-y'' + Vy = 0$ , où  $V$  vérifie (3.1), alors  $y(x)$  a un nombre fini de zéros (éventuellement aucune).*

**Preuve :**

Par le théorème d'unicité tous les zéros sont isolés, et si nous choisissons  $N$  telle que  $V(x) \geq 0$  pour  $|x| \geq N$ , alors  $y$  admet au plus un zéro sur chacun des semi-intervalles  $[N, +\infty)$  et  $(-\infty, -N]$ , conformément aux résultats du théorème 3.1.1. Cela implique immédiatement l'assertion désirée.

■

**Corollaire 3.1.1.** *Chaque fonction propre de  $H$  a un nombre fini de zéros (ou aucun).*

**Proposition 3.1.2.** *Si  $y_1, y_2$  sont des fonctions propres associées à les valeurs propres  $\lambda_1, \lambda_2$  et  $n_1, n_2$  sont le nombre de zéros, alors  $\lambda_2 > \lambda_1$  implique  $n_2 > n_1$ .*

**Preuve :**

Supposons que  $n_1 > 0$ . Soit  $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_{n_1}$  tous les zéros de  $y_1$ . D'après le théorème 3.1.1, il existe un zéro de  $y_2$  dans chaque intervalles ouverts  $(\alpha_i, \alpha_{i+1})$ ,  $i = 1, \dots, n_1 - 1$ . Nous montrons en outre qu'au moins un zéro peut être trouvée dans chacun des intervalles  $(-\infty, \alpha_1)$  et  $(\alpha_{n_1}, \infty)$ , qui n'est certainement pas surprenant parce que  $y_1$  est nulle à l'infini, et nous devons seulement généraliser l'assertion du théorème 3.1.1 à un intervalle semi-infini.

Considérons l'intervalle  $(\beta, +\infty)$  et, raisonnant par l'absurde, supposons que  $y_2(x) > 0$  pour  $x \in (\beta, +\infty)$ ,  $y_1(\beta) = 0$ . On peut aussi supposer, sans perte de généralité, que  $y_1(x) > 0$  pour  $x \in (\beta, +\infty)$ . Comme dans la preuve du théorème 3.1.1, on obtient

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\beta}^N (y_1 y_2'' - y_1'' y_2) dx + \int_{\beta}^N (\lambda_2 - \lambda_1) y_1 y_2 dx \\ &= (y_1 y_2' - y_1' y_2) \Big|_{\beta}^N + \int_{\beta}^N (\lambda_2 - \lambda_1) y_1 y_2 dx. \end{aligned}$$

Puisque, par hypothèse  $y_1(\beta)y_2'(\beta) - y_1'(\beta)y_2(\beta) \leq 0$ , il s'ensuit que

$$y_1(N)y_2'(N) - y_1'(N)y_2(N) \leq -\epsilon < 0 \quad (3.2)$$

pour tout  $N \geq \beta + 1$  (on peut prendre comme  $\epsilon$ , par exemple,  $\int_{\beta}^{\beta+1} (\lambda_2 - \lambda_1)y_1y_2 dx$ ). Notons que, puisque  $y_1, y_2$  sont des solutions positives en décadence des équations correspondantes,  $y_1'(N) \leq 0$  et  $y_2'(N) \leq 0$  pour  $N \geq N_0$ . Donc (3.2) implique maintenant que

$$y_1(N)y_2'(N) \leq -\epsilon < 0, \quad N > N_0,$$

ce qui est impossible parce que  $y_1(N) \rightarrow 0, y_2'(N) \rightarrow 0$  quand  $N \rightarrow +\infty$ .

Il reste maintenant à examiner le cas  $n_1 = 0$ , *i.e.*  $y_1$  n'admet pas des zéros du tout, et de montrer que  $y_2$  doit avoir au moins un zéro. Cela peut provenir de la même manière sur l'intervalle infini  $(-\infty, +\infty)$ , mais peut également être obtenu d'une manière simple en notant que  $y_1$  et  $y_2$  doivent être orthogonales et, par conséquent, ne peuvent pas à la fois préserver leur signe.

■

### 3.2 Théorèmes sur le comportement asymptotique des solutions de certaines équations différentielles de second ordre

Soit

$$Hy = -y'' + Vy, \quad (3.3)$$

où comme précédemment,  $V = V(x)$  est mesurable, à valeurs réelles et localement bornée, on étudie le comportement des solutions de l'équation

$$Hy = k^2y \quad (3.4)$$

quand  $x \rightarrow +\infty$ . Ici  $k$  est un nombre complexe. D'abord, nous étudions le cas d'un potentiel  $V$  décomposable et obtenir des résultats pour le cas où le potentiel croissant au moyen de la transformation de Liouville.

Notent que par une solution de l'équation (3.4), nous aurons toujours dire que  $y = y(x)$  a une dérivée  $y'(x)$  absolument continue partout, l'équation (3.4) étant valable par rapport à  $x$  presque partout. Ensuite, le théorème d'existence et d'unicité (avec des conditions initiales  $y(x_0) = y_0$  et  $y'(x_0) = y'_0$ ) est vérifié, ce qui peut facilement être vérifié en reproduisant sa preuve par la méthode du Peano, c'est, en passant au système du premier ordre, puis à l'équation intégrale et en utilisant la méthode des approximations successives.

### 3.2.1 Cas d'un potentiel intégrable

Si  $V(x) = 0$  pour  $x \geq N$ , alors pour  $k \neq 0$  toute les solutions de l'équation (3.4) pour  $x \geq N$  se transforme en une combinaison linéaire des fonctions  $e^{ikx}$  et  $e^{-ikx}$ . Si  $V(x)$  se décompose assez rapidement, alors l'équation (3.4) a pour  $k \neq 0$  un système fondamental de deux solutions, se comportant comme  $e^{ikx}$  et  $e^{-ikx}$  quand  $x \rightarrow +\infty$ . Un énoncé précis dans ce cas est la suivante.

**Théorème 3.2.1.** *Soit le potentiel  $V$  satisfait*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |V(x)| dx < \infty \tag{3.5}$$

*et soit  $k \neq 0$  fixe. Alors l'équation (3.4) admet deux solutions  $y_1(x)$  et  $y_2(x)$ , telle que*

$$y_1(x) = e^{ikx}(1 + o(1)), \tag{3.6}$$

$$y_2(x) = e^{-ikx}(1 + o(1)) \tag{3.7}$$

*quand  $x \rightarrow +\infty$ .*

*Soit  $k = \sigma + i\tau$ , où  $\tau \geq 0$ . Alors la solution  $y_1(x)$  qui vérifie la condition (3.6) est défini de manière unique comme solution de l'équation intégrale suivante :*

$$y(x) = e^{ikx} + \int_x^{\infty} \frac{\sin k(\xi - x)}{k} V(\xi)y(\xi) d\xi. \tag{3.8}$$

Avant de prouver le théorème, nous montrerons l'équation intégrale (3.8), qui joue un rôle important dans la preuve. En supposant pour simplifier que  $V(x) = 0$  pour  $x \geq N$ , on écrit l'équation (3.4) par :

$$-y'' + k^2y(x) = V(x)y(x),$$

soit  $f(x) = V(x)y(x)$  et effectuer une variation des paramètres pour résoudre l'équation ainsi obtenue :

$$y'' + k^2y(x) = f.$$

Nous obtenons

$$y(x) = C_1e^{ikx} + C_2e^{-ikx} + \int_x^\infty \frac{\sin k(\xi - x)}{k} V(\xi)y(\xi)d\xi,$$

et (3.8) est résulte du choix d'une solution avec l'asymptotique nécessaires à l'infini (la solution avec l'asymptotique (3.6) est unique). Le plus court chemin de varier les paramètres est à noter que la solution de l'équation

$$y'' + k^2y(x) = \delta(x - \xi),$$

où  $y(x) = 0$  pour  $x$  grand, est

$$y_\xi(x) = \frac{1}{k}\theta(\xi - x) \sin k(\xi - x),$$

où  $\theta$  est la fonction de Heaviside

$$\theta(z) = \begin{cases} 1 & \text{si } z > 0 \\ 0 & \text{si } z \leq 0 \end{cases}.$$

D'où l'intégrale dans (3.8) détermine ici une solution qui s'annule pour  $x$  grand. Toutefois, si l'on ajoute la solution  $e^{ikx}$  de l'équation homogène, on obtient des solutions à l'asymptotique nécessaires quand  $x \rightarrow +\infty$ .

Nous passons maintenant à la preuve du théorème 3.2.1.

**Preuve :**

Supposons que  $k \neq 0$  et  $k = \sigma + i\tau$ , où  $\tau \geq 0$ . D'abord soit  $y(x)$  satisfait (3.4) et (3.6). Nous allons montrer que dans ce cas  $y(x)$  vérifie aussi (3.8). Posons  $z(x) = y(x)e^{-ikx}$ , nous voyons que (3.8) se transforme en l'équation suivante pour  $z(x)$  :

$$z(x) = 1 + \int_x^\infty \frac{e^{2ik(\xi-x)} - 1}{2ik} V(\xi)z(\xi)d\xi, \quad (3.9)$$

où l'intégrale sur le côté droit de (3.9) converge absolument par (3.5) et (3.6) et on a l'inégalité :

$$\left| \frac{e^{2ik(\xi-x)} - 1}{2ik} \right| \leq C(k) \text{ pour } \xi - x \geq 0 \quad (3.10)$$

( $C(k)$  peut être égal à  $1/|k|$ ).

Par conséquent, l'équation (3.8) a un sens pour la fonction  $y(x)$ .

On note le côté droit de l'équation (3.8) par  $\bar{y}(x)$  (la fonction posée est remplacé par  $y(x)$ ). Ensuite, nous pouvons vérifier par différentiation directe que  $\bar{y}(x)$  vérifie l'équation :

$$-\bar{y}'' = k^2\bar{y}(x) - V(x)y(x). \quad (3.11)$$

Puisque  $y(x)$  est une solution de (3.4), on trouve de (3.11) que  $\bar{y}(x) - y(x)$  vérifie l'équation :

$$-(\bar{y}(x) - y(x))'' = k^2(\bar{y}(x) - y(x)).$$

D'où

$$\bar{y}(x) - y(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$$

Il résulte de (3.6) que  $C_1 = C_2 = 0$ . En effet, la définition de  $\bar{y}(x)$  implique (voir (3.9) et (3.10)) que  $\bar{y}(x) = e^{ikx}(1 + o(1))$  quand  $x \rightarrow +\infty$ ; donc aussi  $y(x)$ . D'où

$$C_1 + C_2 e^{-ikx} \rightarrow 0 \text{ quand } x \rightarrow +\infty.$$

Puisque  $\tau \geq 0$  et  $k \neq 0$ , il s'ensuit que  $C_1 = C_2 = 0$ , i.e.  $\bar{y} = y$ . D'où  $y$  satisfait (3.8), selon les besoins.

Inversement, soit  $y$  rempli (3.8), où l'intégrale converge absolument. Alors  $z(x) = y(x)e^{-ikx}$  satisfait (3.9) où l'intégrale converge aussi absolument. Mais de cela, il s'ensuit évidemment que  $z(x) = 1 + o(1)$  lorsque  $x \rightarrow +\infty$  et par conséquent  $y(x)$  a le comportement asymptotique (3.6). Mais nous pouvons maintenant différencier (3.8) deux fois par rapport à  $x$ , et de voir que  $y$  satisfait (3.4). Notons aussi que pour la convergence absolue de l'intégrale dans (3.9), est suffisant, en raison de (3.10), pour  $z(x)$  borné. Pour compléter la preuve, on utilise la proposition suivante :

**Proposition 3.2.1.** *Si  $y(x) = e^{ikx}z(x)$ , où  $z(x)$  est borné, alors  $y(x)$  satisfait (3.8) si et seulement si  $y(x)$  satisfait (3.4) et (3.6), c'est-à-dire,  $z(x) \rightarrow 1$  quand  $x \rightarrow +\infty$ . L'équation (3.8) n'a plus qu'une solution de la forme ci-dessus.*

Nous continuons la preuve du théorème 3.2.1. puisque (3.8) est réduite à (3.9), pour trouver une équation satisfaisant (3.6) il suffit de montrer qu'il existe une solution

bornée  $z(x)$ ,  $\forall x$  de l'équation (3.9) (par la proposition 3.2.1 une telle solution est unique).

On va résoudre l'équation (3.9) par approximations successives, en supposant que

$$z_0(x) = 1, \quad z_{k+1}(x) = 1 + \int_x^\infty \frac{e^{2ik(\xi-x)} - 1}{2ik} V(\xi) z_k(\xi) d\xi. \quad (3.12)$$

Il est facile de prouver que les approximations (3.12) convergent uniformément par rapport à  $x$  pour  $x \geq N$ . Ainsi, considérer l'espace  $C([N, +\infty])$  des fonctions continues  $z(x)$  sur  $[N, +\infty[$  et admettant une limite à l'infini, telle que  $\lim_{x \rightarrow \infty} z(x) = z(+\infty)$  muni par la norme suivant :

$$\|z(x)\| = \sup_{x \in [N, +\infty)} |z(x)|$$

l'espace  $C(N, +\infty)$  est évidemment un espace de Banach alors l'opérateur  $A$  défini par la formule

$$Az(x) = \int_x^\infty \frac{e^{2ik(\xi-x)} - 1}{2ik} V(\xi) z(\xi) d\xi,$$

est un opérateur linéaire continu dans cet espace, de telle sorte que

$$\|A\| \leq C(k) \int_N^\infty |V(\xi)| d\xi,$$

où  $C(k)$  a été prendre à partir de (3.10). De ceci, pour  $N$  suffisamment grand, on obtient  $\|A\| < 1$ , ce qui donne la convergence des approximations (3.12) pour  $x \geq N$  par rapport à la norme de l'espace  $C([N, +\infty))$ .

La solution  $z(x)$  de l'équation (3.9) a été trouvée pour  $x \geq N$ , il peut être facilement déterminée pour tout  $x$  dans le domaine de  $V(x)$  par continuité de la fonction  $y(x) = z(x)e^{ikx}$  à la gauche du point  $x = N$ , de sorte que, c'est partout une solution de l'équation (3.4).

Nous savons donc comment construire une solution  $y_1(x)$  de l'équation (3.4) qui vérifié (3.6). Nous allons maintenant prendre à bord la construction d'une solution  $y_2(x)$  satisfaisant (3.7) et, par conséquent,  $y_1(x)$  est linéairement indépendant. Notons d'abord que pour un réel  $k$  non nul, la solution  $y_2(x)$  est construit de la même manière que  $y_1(x)$ . Si, toutefois,  $k = \sigma + i\tau$ , où  $\tau > 0$ , que l'on supposera désormais, alors on peut s'attendre à ce que toute solution  $y_1(x)$  linéairement indépendante croît que

$e^{-ikx}$  quand  $x \rightarrow +\infty$  et qui vérifié (3.7) après avoir normalisé en multipliant par une constante.

Considérer le déterminant wronskien des deux solutions,  $y_1(x)$  et  $y_2(x)$  :

$$W(x) = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y_1' & y_2' \end{vmatrix}$$

clairement,  $W(x) = \text{const}$  et en normalisant  $y_2(x)$ , nous obtenons  $W(x) = -2ik$ , ce qui équivaut à la wronskien de  $e^{ikx}$  et  $e^{-ikx}$ . Considérons la relation

$$y_2' y_1 - y_2 y_1' = -2ik$$

comme une équation différentielle linéaire non homogène. Tenant compte que  $y_1(x)$  est une solution de l'équation homogène, en supposant que

$$y_2(x) = C(x)y_1(x), \quad (3.13)$$

d'où il s'ensuit que  $y_1^2(x)C''(x) = -2ik$ , par conséquent,

$$C(x) = C(x_0) - \int_{x_0}^x \frac{2ik}{y_1^2(x)} dx.$$

Puisque  $\tau > 0$ , la valeur de  $C(x_0)$  n'est pas important, ainsi nous pouvons prendre  $C(x_0) = 0$ . De (3.6), il est clair que :

$$y_1^{-2}(x) = e^{-2ikx}(1 + g(x, k))$$

où  $g(x, k) \rightarrow 0$  quand  $x \rightarrow +\infty$  ( $k$  est fixé). Cela implique que

$$\begin{aligned} C(x) &= -2ik \int_{x_0}^x e^{-2ik\xi}(1 + g(\xi, k))d\xi \\ &= C_0 + e^{-2ikx} - 2ik \int_{x_0}^x e^{-2ik\xi}g(\xi, k)d\xi, \end{aligned}$$

de sorte que, par (3.6) et (3.13), il suffit de prouver la limite de la relation suivante :

$$\int_{x_0}^x e^{2ik(x-\xi)}g(\xi, k)d\xi \rightarrow 0 \text{ quand } x \rightarrow +\infty \quad (3.14)$$

En effet, (3.14) et l'expression de  $C(x)$  impliquent que  $C(x) = e^{-2ikx}(1 + o(1))$ , d'où

$$y_2(x) = C(x)y_1(x) = e^{-2ikx}(1 + o(1))(1 + o(1)) = e^{-ikx}(1 + o(1)),$$

comme nécessiter. Nous allons maintenant démontrer (3.14). Séparer l'intervalle d'intégration par le point  $x/2$ , nous estimons les intégrales obtenues. Nous avons évidemment

$$\left| \int_{x_0}^{x/2} e^{2ik(x-\xi)} g(\xi, k) d\xi \right| \leq C_1 \int_{x_0}^{x/2} e^{-2r(x-\xi)} d\xi \leq C_2 e^{-rx},$$

où  $C_1, C_2$  sont des constantes indépendantes de  $x$ . En outre,

$$\left| \int_{x/2}^x e^{2ik(x-\xi)} g(\xi, k) d\xi \right| \leq \int_{x/2}^x e^{-2r(x-\xi)} g(\xi, k) d\xi \leq \max_{\xi \geq x/2} |g(\xi, k)| \int_0^\infty e^{-2r\eta} d\eta,$$

d'où il s'ensuit que les deux parties de l'intégrale tendent vers 0 lorsque  $x \rightarrow +\infty$ , et par conséquent, d'où (3.14). Le théorème 3.2.1 est maintenant complètement démontré. ■

Nous donnons maintenant une méthode plus précise de résolution de l'équation (3.8), ce qui nous permettra d'estimer les solutions, ainsi que d'étudier leur comportement quand  $k \rightarrow \infty$  et  $k \rightarrow 0$ . Cette méthode est basée sur la comparaison des deux équations intégrales

$$f(x) = f_0(x) + \int_G A(x, \xi) f(\xi) d\xi, \tag{3.15}$$

$$g(x) = g_0(x) + \int_G B(x, \xi) g(\xi) d\xi, \tag{3.16}$$

où le domaine d'intégration  $G$  est arbitraire mais le même dans les deux équations. Pour abrégé, on pose

$$f = f_0 + Af$$

$$g = g_0 + Bg$$

où  $A$  et  $B$  sont les opérateurs intégraux correspondant.

Les équations (3.15) et (3.16) seront considérées dans l'espace  $B(G)$ , partout définies, bornées, et mesurables sur  $G$ , en supposant que  $f_0(x), g_0(x) \in B(G)$ . La mesurabilité, bien sûr, est destinée à l'égard de la mesure  $d\xi$  à partir (3.15) et (3.16) définie sur  $G$ . Note que  $B(G)$  est un espace de Banach muni de la norme

$$\|f\| = \sup_{x \in G} |f(x)|.$$

Supposons également que les opérateurs intégraux  $A$  et  $B$  sont définies et bornés dans  $B(G)$ . Pour cela, il suffit, par exemple, pour  $A(x, \xi)$  et  $B(x, \xi)$  pour être mesurables sur  $G \times G$  et également mesurable par rapport  $\xi$  sur  $G$  pour tout  $x \in G$  fixé, et pour les intégrales  $\int |A(x, \xi)|d\xi$ ,  $\int |B(x, \xi)|d\xi$  d'être uniformément bornés en  $x$ .

La résolution d'équations (3.15) et (3.16) par la méthode des approximations successives résulte les séries itératives suivantes :

$$f = f_0 + Af_0 + \dots + A^n f_0 + \dots, \tag{3.17}$$

$$g = g_0 + Bg_0 + \dots + B^n g_0 + \dots, \tag{3.18}$$

dans le cas de leur convergence uniforme (convergence en norme de  $B(G)$ ) défini les solutions des équations (3.15) et (3.16).

La proposition suivante est importante.

**Proposition 3.2.2.** *Supposer que les noyaux  $A(x, \xi)$ ,  $B(x, \xi)$  Satisfont*

$$|A(x, \xi)| \leq B(x, \xi), \quad x, \xi \in G, \tag{3.19}$$

*et les fonctions  $f_0$ ,  $g_0$  vérifiont*

$$|f_0(x)| \leq g_0(x), \quad x \in G. \tag{3.20}$$

*Si les séries itératives (3.18) converge uniformément, alors il en est (3.17). La somme de cette série est une solution de (3.15) pour laquel*

$$|f(x)| \leq g(x), \tag{3.21}$$

*où  $g(x)$  est la somme de (3.18).*

**Preuve :**

La preuve est évidemment obtenu par une application triviale de critère de Cauchy aux série (3.17).

■

Nous allons maintenant examiner l'unicité d'une solution.

**Proposition 3.2.3.** *Si les séries itératives (3.17) convergent uniformément pour toute  $f_0 \in B(G)$ . Alors, la solution de l'équation (3.15) est unique pour toute  $f_0 \in B(G)$ .*

**Preuve :**

Il suffit de montrer que  $f \in B(G)$  et  $f = Af$  implique que  $f(x) = 0$  pour  $x \in G$ . Mais la série  $f + Af + A^2f + \dots = f + f + f + \dots$  converge par hypothèse. D'où l'assertion est prouvée.

■

**Corollaire 3.2.1.** *Si (3.19) est vérifiée, et les séries (3.18) convergent uniformément pour  $g_0(x) = 1$ , alors pour toute  $f_0(x) \in B(G)$  il existe une unique solution de l'équation (3.15).*

**Théorème 3.2.2.** *Si  $V$  satisfait (3.5) et  $\text{Im}k \geq 0$ , alors la solution  $y_1(x)$  de l'équation (3.4) avec le comportement asymptotique (3.6) pour  $k \neq 0$  satisfait*

$$y_1(x) = e^{ikx} \left( 1 + \frac{o(1)}{|k|} \right) \quad (3.22)$$

où  $o(1)$  est uniforme par rapport à  $k$ .

Si, de plus,  $V$  satisfait la condition suivante

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi |V(\xi)| d\xi < \infty \quad (3.23)$$

alors pour  $k = 0$ , il existe également une solution unique avec le comportement asymptotique (3.6) et

$$y_1(x) = e^{ikx} \left( 1 + \frac{o(1)}{1 + |k|} \right), \quad (3.24)$$

où  $o(1)$  est uniforme par rapport à  $k$ , comme ci-dessus.

Nous allons maintenant examiner la dépendance de la solution en décadence de (3.4) (plus précisément, la solution avec le comportement asymptotique (3.6)) sur le paramètre  $k$ . Nous désignons cette solution par  $y(x, k)$  et écrivons

$$y(x, k) = e^{ikx} z(x, k).$$

Les deux fonctions  $y(x, k)$  et  $z(x, k)$  sont définis pour  $Imk \geq 0, k \neq 0$ . Si  $V$  satisfait (3.23), ils sont également définis pour  $k = 0$ . Dans ce cas, pour tout  $k$  admissible ( $k$  étant fixé),  $y(x, k)$  et  $z(x, k)$  appartient à l'espace  $C_b([0, \infty))$  des fonctions continues, bornées à valeurs complexes sur  $[0, \infty)$ .

**Théorème 3.2.3.** *Soit  $V$  intégrable. Alors  $y(x, k)$  et  $z(x, k)$  sont des fonctions holomorphes dans le demi-plan  $Im k > 0$  avec les valeurs de l'espace de Banach complexe  $C_b([0, \infty))$ ,  $z(x, k)$  étant continue pour  $Im k \geq 0, k \neq 0$ .*

**Remarque 3.2.1.** *Lorsque  $k$  est réel,  $e^{ikx}$  n'est pas une fonction continue à valeurs dans  $C_b([0, \infty))$ .*

**Preuve du théorème 3.2.3 :**

Il est clair qu'il suffit de prouver les assertions du théorème pour  $z(x, k)$ . Mais  $z(x, k)$  est une solution de l'équation intégrale (3.9) exprimée par la formule

$$z(x, k) = (I - A_k)^{-1}.1$$

(le résultat de l'application  $(I - A_k)^{-1}$  à une fonction, de manière identique égal à 1, où  $A_k$  est l'opérateur d'intégrale

$$A_k f(x) = \int_x^\infty \frac{e^{2ik(\xi-x)} - 1}{2ik} V(\xi) f(\xi) d\xi.$$

puisque l'existence de l'opérateur  $(I - A_k)^{-1}$  a déjà été prouvé, la vérification de l'holomorphie ou la continuité de  $z(x, k)$  se réduit à cela de l'opérateur  $A_k$  muni de la topologie uniforme d'opérateur. C'est simple, prendre en considération la convergence uniforme de toutes les intégrales à impliqué.

■

Enfin, en utilisant les résultats obtenus, on obtient une représentation importante d'intégral pour  $y(x, k)$ .

**Théorème 3.2.4.** *Si  $V(x)$  satisfait (3.23), alors*

$$y(x, k) = e^{ikx} + \int_x^\infty A(x, s) e^{iks} ds, \tag{3.25}$$

où la fonction  $A(x, s)$  défini pour  $s \geq x \geq 0$  a les propriétés suivantes :

1)  $A(x, s)$  est mesurable par rapport à ces deux variables (par la mesure de Lebesgue) dans son domaine ;

2) Si l'on définit en plus  $A(x, s) = 0$  pour  $0 \leq s \leq x$ , alors  $A(x, s)$  est une fonction continue par rapport à  $x$  a valeurs dans l'espace  $L^2([0, \infty))$  par rapport à la variable  $s$  ;

3)

$$\int_x^\infty |A(x, s)|^2 ds \rightarrow 0 \text{ quand } x \rightarrow +\infty.$$

L'intégrale (3.25) est comprise comme la transformée de Fourier-Plancherel d'une fonction a carré intégrable.

**Preuve :**

Soit

$$y(x, k) = e^{ikx}(1 + f(x, k)) \tag{3.26}$$

et notent par les théorèmes 3.2.2, 3.2.3 et le théorème de *Wiener-Paley* (voir Shilov [8]), que  $f(x, k)$  une fonction de  $k$  peut s'écrire comme la transformée de *Fourier* par rapport à  $t$  de  $B(x, t) \in L^2([0, \infty))$ , *i.e.*

$$f(x, k) = \int_0^\infty B(x, t)e^{ikt} dt, \tag{3.27}$$

où l'intégrale (3.27) est considérée comme la limite lorsque  $N \rightarrow +\infty$  de l'intégrale sur  $[0, N]$  par la norme de  $L^2(\mathbb{R})$ . En substituant (3.27) en (3.26), remplaçant  $x + t = s$  dans la fonction intégrale, et la mise en  $A(x, s) = B(x, s - x)$ , on obtient la représentation (3.25). Il reste à montrer que  $A(x, s)$  vérifie 1) –3).

Notent que par l'égalité de *Parseval*, 3) découle directement de l'estimation (3.24). De cela, nous pouvons aussi facilement déduire la bornitude de la norme de  $A(s, x)$  dans  $L^2([0, \infty))$  par rapport à  $s$ .

2) suit d'une propriété semblable de  $z(x, k)$  qui suit facilement du théorème 3.2.3 et le théorème de convergence dominée.

Pour prouver 1) il suffit de noter que  $B(x, t)$  peut être interprétée comme

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-N}^N f(x, k)e^{-ikt} dk$$

par la norme de  $L^2([0, M] \times [0, \infty))$  sur n'importe quel "rectangle"  $x \in [0, M]$ ,  $t \in [0, \infty)$  et, par conséquent, on peut supposer que  $B(x, t)$  est de carré intégrable sur une telle rectangle.

■

### 3.2.2 Potentiel de diffusion sur la droite réelle

#### Cas de l'Hamiltonien libre

Nous commençons avec une analyse systématique du problème de diffusion libre sur  $\mathbb{R}$ , lorsque l'hamiltonien quantique est donnée par

$$H_0 = D_x^2 = -\partial_x^2$$

où  $D_x = \frac{1}{i}\partial_x$ . Son équation propre est

$$(H_0 - \lambda^2)u = 0 \tag{3.28}$$

avec la solution générale donnée par

$$u = Ae^{i\lambda x} + B e^{-i\lambda x} \tag{3.29}$$

où  $A$  et  $B$  sont des constantes arbitraires. En outre, l'équation de Schrödinger

$$\begin{cases} (i\partial_t - H)V = 0 \\ v|_{t=0} = V_0 \end{cases} \tag{3.30}$$

est résolu par

$$V(t, x) = \frac{1}{(4\pi ti)^{\frac{1}{2}}} \int e^{-\frac{(x-y)^2}{4ti}} V_0(y) dy. \tag{3.31}$$

En particulier, lorsque  $v_0 = u$  où  $u$  est donné par (3.29), nous avons

$$V(t, x) = Ae^{i\lambda x - i\lambda^2 x} + B e^{-i\lambda x - i\lambda^2 x}. \tag{3.32}$$

Prenez  $\lambda > 0$  et écrivez la phase comme

$$\lambda(x - \lambda t) \quad \text{et} \quad \lambda(x + \lambda t)$$

Nous pouvons penser que le premier terme de (3.32) comme une onde se déplaçant vers la droite et le second terme comme une onde se déplaçant vers la gauche. Par conséquent, nous appelons

$$Ae^{i\lambda x} \text{ pour } x < 0, \quad Be^{-i\lambda x} \text{ pour } x > 0$$

les termes entrants, et

$$Ae^{i\lambda x} \text{ pour } x > 0, \quad Be^{-i\lambda x} \text{ pour } x < 0$$

les termes sortants.

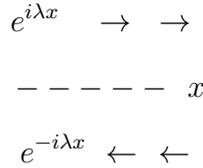


Figure 1

Par conséquent, la solution  $e_+(x, \lambda) := e^{i\lambda x}$  de (3.28) est entrant pour  $x < 0$  et sortants pour  $x > 0$ . De même, la solution  $e_-(x, \lambda) := e^{-i\lambda x}$  de (3.29) est entrant pour  $x > 0$  et sortants pour  $x < 0$ . Nous les appelons les ondes planes. Clairement, il n'existe pas de solution de (3.28) uniquement avec termes entrants ou les termes sortants pour  $\lambda \neq 0$ . Néanmoins, pour  $\lambda = 0$ , la solution  $u \equiv 1$  est considéré comme un terme entrant et sortant. Bien que l'intuition physique sous-jacente à notre convention entrant et sortant n'a de sens que pour  $\lambda > 0$ , nous adopterons la même convention pour tout  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Notent que cela équivaut à une convention de prendre la racine carrée de l'énergie  $\lambda^2$ .

Alors, nous considérons l'équation

$$(H_0 - \lambda^2)u = f \quad \text{for } f \in C_0^\infty(\mathbb{R}). \tag{3.33}$$

Elle possède une solution sortie unique, et une solution entrée unique donné par

$$u_\pm(x, \lambda) = \pm \frac{i}{2\lambda} \int f(y) e^{\pm i\lambda|x-y|} dy \tag{3.34}$$

où le signe plus (+) désigne la solution sortant et le signe moins (−) désigne la solution entrant.

Notent que l'unicité de la solution découle du fait qu'il n'y a pas de solution entrant ou sortant de l'équation propre (3.28) comme mentionné ci-dessus.

Une caractérisation alternatif de la solution sortant ou entrant  $u_{\pm}$  de (3.33) est que

$$u_+(x, \lambda) \in L^2(\mathbb{R}) \quad \text{pour } \operatorname{Im}\lambda > 0$$

et

$$u_-(x, \lambda) \in L^2(\mathbb{R}) \quad \text{pour } \operatorname{Im}\lambda < 0$$

Nous avons aussi

$$u_+(x, \lambda) = \overline{u_-(x, \lambda)} = u_-(x, -\lambda). \quad (3.35)$$

Nous pouvons maintenant définir la résolvante de la solution sortant de  $H_0$ ,  $R_0(\lambda)$ , par

$$u_+ = R_0(\lambda)f \quad \text{pour } f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$$

et  $R_0(-\lambda)$  est alors définie comme la résolvante de la solution entrant qui vérifiée

$$u_- = R_0(-\lambda)f \quad \text{pour } f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$$

par (3.35). Notent que (3.34) implique

$$R_0(\lambda)(x, y) = \frac{i}{2\lambda} e^{i\lambda|x-y|} \quad (3.36)$$

Il est claire que, le résolvante sortant  $R_0(\lambda)$  est borné sur  $L^2(\mathbb{R})$  pour  $\operatorname{Im}\lambda > 0$ . En outre, sa norme est donnée par

$$\|R_0(\lambda)\|_{L^2 \rightarrow L^2} = \frac{1}{\operatorname{dist}(\mathbb{R}^+, \lambda^2)} \quad (3.37)$$

où  $\operatorname{dist}(\mathbb{R}^+, \lambda^2)$  désigne la distance entre  $\lambda^2$  et l'axe réel positif  $\mathbb{R}^+$ . Cela découle de la théorie spectrale des opérateurs auto-adjoints.

**Remarque 3.2.2.** *Dans notre cas, il peut être vu directement à partir du théorème de Plancherel. En effet, pour  $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ , nous avons*

$$R_0(\lambda)f = \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{(\cdot)^2 - \lambda^2} \mathcal{F}f\right)$$

où  $F$  est la transformée de Fourier. Puisque

$$\left\| M \frac{1}{(\cdot)^{2-\lambda^2}} \right\|_{L^2 \rightarrow L^2} = \sup_{\xi \in \mathbb{R}} \frac{1}{\xi^2 - \lambda^2} = \frac{1}{\text{dist}(\mathbb{R}^+, \lambda^2)}$$

avec  $M_g(u) = gu$  désignant l'opérateur de multiplication, (3.37) suivant.

Also, by (3.36),

**Lemme 3.2.1.**  $R_0(\lambda)$  en tant qu'opérateur

$$R_0(\lambda) : L^2_{\text{comp}}(\mathbb{R}) \rightarrow L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R})$$

a une extension méromorphe pour  $\lambda \in \mathbb{C}$  avec un pôle simple en  $\lambda = 0$ .

**Preuve :**

En effet, nous avons

$$R_0(\lambda) = \frac{P}{\lambda} + Q(\lambda)$$

avec  $(Pf)(x) = \frac{i}{2} \int_{\mathbb{R}} f(y) dy$  pour  $f \in L^2_{\text{comp}}(\mathbb{R})$  et  $Q(\lambda) : L^2_{\text{comp}}(\mathbb{R}) \rightarrow L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R})$  being entire in  $\lambda \in \mathbb{C}$ . formellement,  $P = \phi \otimes \bar{\phi}$  où  $\phi(x) = \frac{e^{\pi i/4}}{\sqrt{2}}$  peut être considéré comme une solution sortant (3.28) à  $\lambda = 0$ .

■

La décomposition spectrale de  $H_0$  peut être donnée par la transformée de Fourier de manière suivante (ici nous utilisons le même symbole de l'opérateur pour désigner son noyau Schwartz)

$$H_0(x, y) = D_x^2(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 e^{i\lambda(x-y)} dy := \int_0^{\infty} \lambda^2 dE_\lambda(x, y) \quad (3.38)$$

Ainsi, la mesure spectrale  $dE_\lambda$  est donnée par

$$\begin{aligned} dE_\lambda(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \left( e^{i\lambda(x-y)} + e^{-i\lambda(x-y)} \right) d\lambda \\ &= \frac{1}{2\pi} (e_+(x, \lambda) \overline{e_+(y, \lambda)} + e_-(x, \lambda) \overline{e_-(y, \lambda)}) d\lambda \\ &= \frac{\lambda}{i\pi} (R_0(\lambda) - R_0(-\lambda))(x, y) d\lambda \end{aligned} \quad (3.39)$$

où la dernière égalité découle de (3.36).

**Remarque 3.2.3.** *Notez que (3.39) est un cas particulier d'un résultat général dans l'analyse fonctionnelle, à savoir la formule de Pierre, et de la décomposition spectrale en termes de fonctions propres généralisées. Pour le voir, nous devons clarifier la convention. Ecrire*

$$H_0 = \int_0^\infty z dE_z = \int_0^\infty \lambda^2 dE_\lambda \quad (z = \lambda^2)$$

*comme toujours (notent que  $H_0$  est un opérateur non négatif). Ainsi  $dE_z = dE_\lambda$ . Pour  $\lambda > 0$ ,  $R_0(\lambda) = R_0(z + i0)$  et  $R_0(-\lambda) = R_0(z - i0)$ . D'où la formule usuel de Stone's,*

$$dE_z = \frac{1}{2\pi i} (R_0(z + i0) - R_0(z - i0)) dz$$

*coïncide avec notre formule (3.39).*

### Hamiltonien perturbé et distorsion des ondes planes

Considérons maintenant l'hamiltonien perturbé sur  $\mathbb{R}$  :

$$H_V = D_x^2 + V \quad \text{pour } V \in L_{comp}^\infty(\mathbb{R})$$

Nous tenons à établir les mêmes résultats que nous avons pour  $H_0$  dans la section précédente. Nous allons d'abord montrer l'existence de la résolvante  $R_V(\lambda)$  qui vérifiée, pour  $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ ,

$$(H_V - \lambda^2)R_V(\lambda)f = f \tag{3.40}$$

avec  $R_V(\lambda)f$  étant la résolvante sortant. Puisque  $R_V(\lambda)f$  est solution de (3.28) pour  $x$  assez grand.

**Théorème 3.2.5.** *L'opérateur*

$$R_V(\lambda) : L_{comp}^2(\mathbb{R}) \rightarrow L_{loc}^2(\mathbb{R})$$

*satisfaisant (3.40) existe comme une fonction méromorphe des opérateurs pour  $\lambda \in \mathbb{C}$  et il n'a pas de pole pour  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ .*

**Preuve :**

Pour  $Im\lambda > 0$ , en appliquant l'opérateur  $H_V - \lambda^2$  à la résolvante, nous obtenons

$$(D_x^2 + V - \lambda^2)R_0(\lambda) = I + VR_0(\lambda) \tag{3.41}$$

Par (3.37), nous avons

$$\|VR_0(\lambda)\|_{L^2 \rightarrow L^2} \ll 1 \text{ pour } Im\lambda \gg 0$$

Ainsi, pour  $Im\lambda \gg 0$ ,

$$(I + VR_0(\lambda))^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (-VR_0(\lambda))^k : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$$

existe et est holomorphe en  $\lambda$ .

Pour  $Im\lambda \gg 0$ , soit

$$R_V(\lambda) = R_0(\lambda)(I + VR_0(\lambda))^{-1} \tag{3.42}$$

Il est clair que  $R_V(\lambda)$  est une famille holomorphe d'opérateurs bornés sur  $L^2(\mathbb{R})$  qui satisfait (3.40). Nous devons montrer que les opérateurs  $R_V(\lambda) : L^2_{comp}(\mathbb{R}) \rightarrow L^2_{loc}(\mathbb{R})$ ,  $R_V(\lambda)$  méromorphiquement continue pour  $Im\lambda \gg 0$ . C'est identique que l'extension

$$R_V(\lambda)\rho : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2_{loc}(\mathbb{R})$$

méromorphiquement à  $\mathbb{C}$  pour tout  $\rho \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ , où  $\rho$  désigne l'opérateur de multiplication correspondant. Notent qu'une fois que le prolongement méromorphe est établie, elle ne dépend pas de  $\rho$  dans le sens suivant :

$$\begin{aligned} & \text{si } \rho_1 \in C_0^\infty(\mathbb{R}) \text{ avec } \rho_1 \equiv 1 \text{ sur } \text{supp } \rho \\ & \text{puis nous avons } (R_V(\lambda)\rho_1)\rho = R_V(\lambda)\rho \end{aligned} \tag{3.43}$$

En effet, c'est évidemment vrai pour  $Im\lambda \gg 0$ , puis pour  $\lambda \in \mathbb{C}$  par prolongement méromorphe. Ensuite, nous observons que, pour  $Im\lambda \gg 0$  et  $\rho \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  avec  $\rho V \equiv V$ ,

$$R_V(\lambda)\rho = R_0(\lambda)\rho(I + VR_0(\lambda)\rho)^{-1} \tag{3.44}$$

par (3.42) et l'égalité

$$(I + VR_0(\lambda))^{-1}\rho = \rho(I + VR_0(\lambda)\rho)^{-1}$$

Ainsi, le prolongement méromorphe de  $R_V(\lambda)$  est réduite à celle de  $(I + VR_0(\lambda)\rho)^{-1}$ . Cela découle de la théorie analytique de Fredholm, une fois que nous constatons que

$$VR_0(\lambda)\rho = V\rho R_0(\lambda)\rho$$

est une famille méromorphe d'opérateurs compacts sur  $L^2(\mathbb{R})$  comme

$$\rho R_0(\lambda)\rho : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow H_{comp}^2(\mathbb{R})$$

pour  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$  est compact et  $V : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$  bornée.

Pour compléter la démonstration du théorème 3.2.5, il reste à montrer qu'il n'y a pas de pôle pour  $R_V(\lambda)$  sur  $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ . Cela se fera en plusieurs étapes. Nous commençons par ;

**Proposition 3.2.4.** *Si  $R_V(\lambda)$  a un pôle à  $\lambda = \lambda_0 \neq 0$  en écrire*

$$R_V(\lambda) = \frac{P_N}{(\lambda - \lambda_0)^N} + \frac{P_{N-1}}{(\lambda - \lambda_0)^{N-1}} + \cdots + \frac{P_1}{\lambda - \lambda_0} + Q(\lambda) \quad (3.45)$$

pour  $\lambda$  près de  $\lambda_0$  où  $Q(\lambda)$  est holomorphe en  $\lambda_0$ , alors  $u \in P_N(L_{comp}^2(\mathbb{R}))$  est une solution sortant de  $(H_V - \lambda_0^2)u = 0$ .

**Preuve :**

Tout d'abord, notent que le développement (3.45) découle de la méromorphie de  $R_V(\lambda)$ . Ensuite, en appliquant l'opérateur  $(\lambda - \lambda_0)^N(H_V - \lambda^2)$  à  $R_V(\lambda)$  et ensuite on pose  $\lambda = \lambda_0$ , on voit que

$$(H_V - \lambda_0^2)P_N \equiv 0.$$

Il reste à montrer que les éléments de  $P_N(L_{comp}^2(\mathbb{R}))$  sont toujours sortant. Pour cela, nous allons  $\rho \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  avec  $\rho V \equiv V$ . Par (3.44), nous pouvons écrire

$$(I + VR_0(\lambda)\rho)^{-1} = \frac{\tilde{P}_N}{(\lambda - \lambda_0)^N} + \cdots + \frac{\tilde{P}_1}{\lambda - \lambda_0} + \tilde{Q}(\lambda)$$

pour  $\lambda$  près de  $\lambda_0$  où  $\tilde{P}_j, \tilde{Q}(\lambda) : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ ,  $j = 1, \dots, N$ , et  $\tilde{Q}(\lambda)$  est holomorphe en  $\lambda_0$ . Alors (3.44) implique également que

$$P_N(\rho L^2(\mathbb{R})) = R_0(\lambda)\rho\tilde{P}_N(L^2(\mathbb{R})) \subset R_0(\lambda)(L_{comp}^2(\mathbb{R}))$$

ce qui signifie que les éléments de  $P_N(L_{comp}^2(\mathbb{R}))$  sont sortants.

■

Ensuite, nous montrons qu'il n'y a pas de solution sortant à  $(H_V - \lambda^2)u = 0$  pour  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ . Cela découle de la proposition suivante :

**Proposition 3.2.5.** *Supposons que  $(H_V - \lambda^2)u = 0$  pour  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  et soit*

$$u(x) = \begin{cases} A_+ e^{i\lambda x} + B_- e^{-i\lambda x} & \text{pour } x \gg 0 \\ A_- e^{i\lambda x} + B_+ e^{-i\lambda x} & \text{pour } x \ll 0 \end{cases}$$

alors

$$|A_+|^2 + |B_+|^2 = |A_-|^2 + |B_-|^2 \tag{3.46}$$

**Preuve :**

Puisque  $\lambda$  est réel,  $\bar{u}$  satisfait également l'équation. Ainsi, le Wronskien de  $u$  et  $\bar{u}$

$$W(u, \bar{u}) = \begin{vmatrix} u & \bar{u} \\ u' & \bar{u}' \end{vmatrix} = \begin{cases} -2i\lambda(|A_+|^2 - |B_-|^2) & \text{pour } x \gg 0 \\ -2i\lambda(|A_-|^2 - |B_+|^2) & \text{pour } x \ll 0 \end{cases}$$

est constante. (3.46) suit immédiatement. ■

**Proposition 3.2.6.** *Supposons que  $u \in L^\infty(\mathbb{R})$  satisfait  $(D_x^2 + W)u = 0$  pour  $W \in L^\infty(\mathbb{R})$  et  $\text{supp } u \subset [0, \infty)$ . Alors  $u \equiv 0$ .*

**Preuve :**

Fixons  $h > 0$ . Soit  $v = e^{-\frac{x}{h}} u$ . Alors, le caractère borné et la propriété de support de  $u$  impliquent que  $v \in L^2(\mathbb{R})$ . Maintenant, nous avons

$$\begin{aligned} \|e^{-\frac{x}{h}} (hD_x)^2 e^{\frac{x}{h}} v\|_{L^2} &= \|(h^2 D_x^2 - 2ihD_x - 1)v\|_{L^2} \\ &= \|(h\xi - i)^2 \hat{v}\|_{L^2} \text{ by Plancherel formula} \\ &\geq \|\hat{v}\|_{L^2} \text{ since } |h\xi - i| \geq 1 \text{ as } h\xi \in \mathbb{R} \\ &= \|v\|_{L^2} \end{aligned}$$

Puisque  $v = e^{x/h} u$ , on obtient

$$\begin{aligned} \|e^{-\frac{x}{h}} u\|_{L^2} &\leq \|e^{-\frac{x}{h}} h^2 D_x^2 u\|_{L^2} \\ &= \|e^{-\frac{x}{h}} h^2 W u\|_{L^2} \\ &\leq \|W\|_{L^\infty} h^2 \|e^{-\frac{x}{h}} u\|_{L^2} \end{aligned}$$

Prenant  $h^2 < \|W\|_{L^\infty}^{-1}$ , on obtient  $e^{-\frac{x}{h}} u \equiv 0$ , i.e.  $u \equiv 0$ .

■

Maintenant, nous pouvons terminer la preuve du théorème 3.2.5. En effet, supposons qu'il existe un pôle de  $R_V(\lambda)$  à  $\lambda_0 \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ . Proposition 3.2.4 implique qu'il existe une solution sortant non nul  $u$  de l'équation  $(H_V - \lambda_0^2)u = 0$ . Proposition 3.2.5 implique alors que  $u$  est en train de disparaître en dehors de certains compact de  $\mathbb{R}$ . Mais Proposition 3.2.6 dit que  $u \equiv 0$ , ce qui est une contradiction. ■

**Remarque 3.2.4.** *Proposition 3.2.5 est la seule partie de la preuve du théorème 3.2.5 qui est plus simple en dimension 1, toutes les parties restantes travaillent dans des dimensions supérieures.*

*Avec la construction de la résolvante  $R_V(\lambda)$  en place, nous pouvons maintenant définir et obtenir les ondes planes distordues qui constituent le spectre continu de  $H_V$ .*

**Proposition 3.2.7.** *Pour  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ , il existe des solutions uniques  $e_{\pm}(x, \lambda)$  de*

$$(H_V - \lambda_0^2)u = 0 \tag{3.47}$$

*satisfaisant  $e_{\pm}(x, \lambda) = e^{\pm i\lambda x} + \text{termes sortants}$ .*

**Preuve :**

Pour  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ , posons

$$e_{\pm}(x, \lambda) = e^{\pm i\lambda x} - R_V(\lambda)(V e^{\pm i\lambda x}) \tag{3.48}$$

ce qui est logique car du théorème 3.2.5. Il est clair que  $e_{\pm}(x, \lambda)$  vérifie l'équation (3.47) et le dernier terme de (3.48) est sortants grâce à (3.44). Unicité obtenue de nouveau à partir de l'inexistence de solution sortant (3.47) a prouvé dans le théorème 3.2.5.

■

**Exemple 3.2.1.** *Pour établir l'analogie du (3.39), nous utilisons une technique standard des ODE pour représenter  $R_V(\lambda)$  en termes de  $e_{\pm}(x, \lambda)$ . Tout d'abord, rappeler que, en général, la solution fondamentale des ODE*

$$(\alpha \partial_x^2 + b(x))E(x, y) = \delta_y(x)$$

peut être écrite en termes de deux solutions linéairement indépendantes  $\psi_j$ ,  $j = 1, 2$  de

$$(\alpha \partial_x^2 + b(x))\psi_j = 0 \quad j = 1, 2$$

à savoir,

$$E(x, y) = \frac{1}{\alpha W} (\psi_1(x)\psi_2(y)(x-y)_+^0 + \psi_1(y)\psi_2(x)(x-y)_-^0) \quad (3.49)$$

où  $W = \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_2 \\ \psi_1' & \psi_2' \end{vmatrix}$  est le Wronskien de  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  et

$$(x-y)_\pm^0 = \begin{cases} 1 & \pm x > \pm y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

désigner les fonctions Heaviside.

Nous appliquons maintenant (3.49) à l'opérateur  $H_V - \lambda^2$  pour  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  et solutions  $\psi_1 = e_+$ ,  $\psi_2 = e_-$ . Notent que, pour  $y$  fixe, à la fois  $e_+(x, \lambda)(x-y)_+^0$  et  $e_-(x, \lambda)(x-y)_-^0$  sont des solutions sortants et donc (3.49) nous donne la résolvante sortant.

Pour écrire  $R_V(\lambda)(x, y)$  explicitement, il faut calculer la Wronskien des  $e_+$  et  $e_-$ . Tout d'abord, observons que, par les propriétés caractérisant des  $e_\pm$ , nous pouvons écrire

$$e_\pm(x, \lambda) = \begin{cases} T_\pm(\lambda)e^{\pm i\lambda x} & \text{pour } \pm x \gg 0 \\ e^{\pm i\lambda x} + R_\pm(\lambda)e^{\mp i\lambda x} & \text{pour } \pm x \ll 0 \end{cases} \quad (3.50)$$

Le calcul du Wronskien  $W$  de  $e_+$  et  $e_-$  pour  $x$  grand et  $x$  négatif grand respectivement, on obtient

$$W = -2i\lambda T_+(\lambda) = -2i\lambda T_-(\lambda)$$

En particulier,

$$T_+(\lambda) = T_-(\lambda) := T(\lambda) \quad (3.51)$$

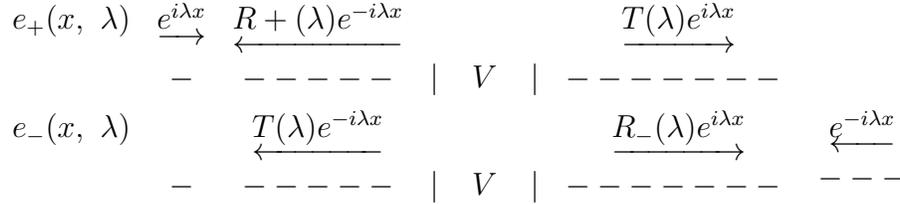


Figure 2

$T(\lambda)$  est appelé le coefficient de transmission et  $R_{\pm}(\lambda)$  les coefficients de réflexion. Maintenant, nous pouvons écrire l'expression  $R_V(\lambda)$  en termes de  $e_{\pm}$  de (3.49). Pour  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ , nous avons

$$R_V(\lambda)(x, y) = \frac{1}{2i\lambda T(\lambda)} (e_+(x, \lambda)e_-(y, \lambda)(x-y)_+^0 + e_+(y, \lambda)e_-(x, \lambda)(x-y)_-^0) \quad (3.52)$$

Cela implique le développement asymptotique utiles suivantes

$$R_V(\lambda)(\pm r, y) = \frac{1}{2i\lambda} e^{\pm i\lambda r} e_{\mp}(y, \lambda) \text{ for } r \gg 0. \quad (3.53)$$

La décomposition spectrale de  $H_V$  est maintenant donnée par

**Théorème 3.2.6.** Soit  $e_{\pm}$  donné par la proposition 3.2.7. puis

$$\delta(x - y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} (e_+(x, \lambda)\overline{e_+(y, \lambda)} + e_-(x, \lambda)\overline{e_-(y, \lambda)})d\lambda + \sum_{j=1}^N e_j(x)\overline{e_j(y)}$$

et

$$H_V(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \lambda^2 (e_+(x, \lambda)e_+(y, \lambda) + e_-(x, \lambda)\overline{e_-(y, \lambda)})d\lambda + \sum_{j=1}^N E_j e_j(x)\overline{e_j(y)} \quad (3.54)$$

où  $E_j = \lambda_j^2$ ,  $j = 1, \dots, N$ ,  $\lambda_j$ s sont des pôles de  $R_V(\lambda)$  pour  $Im\lambda > 0$ , et  $(H_V - E_j)e_j = 0$  avec  $\|e_j\|_{L^2} = 1$ .

**Preuve :**

Le théorème 3.2.5 et la bornitude de  $V$ ,  $H_V$  agissant en  $C_0^{\infty}(\mathbb{R})$  présente une extension auto-adjoint sur  $L^2(\mathbb{R})$  dont le spectre est constitué d'un nombre fini de valeurs propres négatives (avec multiplicité) et une partie continue  $[0, \infty)$ . Par conséquent

$$H_V = \sum_{j=1}^N E_j e_j \otimes \bar{e}_j + \int_0^{\infty} z dE_z = \sum_{j=1}^N E_j e_j \otimes \bar{e}_j + \int_0^{\infty} \lambda^2 dE_{\lambda} \quad (3.55)$$

où les  $E_j$  sont des valeurs propres de  $H_V$  et les  $e_j$  sont les fonctions propres normalisés correspondants, *i.e*  $(H_V - E_j)e_j = 0$ ,  $\|e_j\|_{L^2} = 1$ . (Dans la deuxième égalité, nous utilisons la substitution  $z = \lambda^2$ ).

Dans notre convention de prendre la racine carrée de  $z$ ,  $E_j = \lambda_j^2$  où les  $\lambda_j$  sont les pôles de  $R_V(\lambda)$  pour  $Im\lambda > 0$ . Pour calculer  $dE_\lambda$  nous utilisons les formules de Stone

$$dE_\lambda = \frac{\lambda}{\pi i} (R_V(\lambda) - R_V(\rightarrow)) d\lambda. \quad (3.56)$$

Nous voulons exprimer le côté droit par les ondes planes distordues  $e_\pm$ . Pour cela, nous utilisons

$$(D_x^2 + V - \lambda^2)R_V(\pm\lambda)(x, y) = \delta(x - y)$$

et la symétrie de  $R_V(\pm\lambda)(x, y)$  par rapport à  $x, y$  to write for fixed  $x, y$  et  $r$  large,

$$\begin{aligned} & (R_V(\lambda) - R_V(-\lambda))(x, y) \\ &= \int_{-r}^r [R_V(\lambda)(x, y')(D_y^2, R_V(\rightarrow)(y', y)) - (D_y^2, R_V(\lambda)(x, y'))R_V(\rightarrow)(y', y)] dy' \\ &= [R_V(\lambda)(x, y')D_{y'}R_V(\rightarrow)(y', y) - D_{y'}R_V(\lambda)(x, y')R_V(\rightarrow)(y', y)]|_{y'=-r}^{y'=r} \\ &= \frac{i}{2\lambda} (e_+(x, \lambda)e_+(y, \lambda) + e_-(x, \lambda)e_-(y, \lambda)) \end{aligned} \quad (3.57)$$

par (3.53). théorème 3.2.6 découle maintenant en le remplaçants (3.57) dans (3.55) et (3.57).

■

# Bibliographie

- [1] A. Martinez, An introduction to semiclassical and microlocal analysis, Universitext, Springer-Verlag, New York, 2002.
- [2] A. Messiah, Mécanique quantique, 2 vols, Dunod, Paris, 1959.
- [3] A. Pankov, Introduction to Spectral Theory of Schrödinger Operators, Department of Mathematics Vinnitsa State Pedagogical University, 21100 Vinnitsa, Ukraine.
- [4] Benjamin GRAILLE et Mathieu LEWIN, Introduction À la Théorie Spectrale des Opérateurs de Schrödinger, sous la direction de Vladimir GEORGESCU, Université de Cergy-Pontoise.
- [5] C. Cohen-Tanoudji, Mécanique Quantique, vol. I,II.
- [6] D. Robert, Autour de l'approximation semi-classique, vol. 68 of Progress in Mathematics, Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1987.
- [7] F. A. Berezint and M. A. Shubin, The Schrödinger Equation, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht-Boston- London, 1991.
- [8] G. E. Shilov, Mathematical Analysis. Special Course, Fizmatgiz, Moscow, 1961. Mathematical Analysis. The Second Special Course, MIT Press, Cambridge, Mass, 1973.
- [9] Gerald Teschl, Mathematical Methods in Quantum Mechanics With Applications to Schrödinger Operators, Universität Wien, Austria, 2000.
- [10] I. M. OLEINIK, On the essential self-adjointness of the Schrödinger operators on a complete Riemannian manifold, Math. Notes. 54 : 934-939, 1993.

- 
- [11] I. M. OLEINIK, On the connection of the classical and quantum mechanical completeness of a potential at infinity on complete Riemannian manifolds, *Math. Notes*. 55 : 380-386, 1994.
- [12] I. M. OLEINIK, On the essential self-adjointness of the Schrödinger-type operators on a complete Riemannian manifold, PhD thesis, Northeastern University, 1997.
- [13] L. Landau and E. Lifschitz, *Physique théorique ("Landau-Lifchitz")*. Tome III : Mécanique quantique. Théorie non relativiste, Éditions Mir, Moscow, 1967. Deuxième édition, Traduit du russe par Édouard Gloukhian.
- [14] M. Dimassi and J. Sjöstrand, Spectral Asymptotics in the semi-classical limit, no. 268 in *London mathematical Society Lecture Notes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [15] M. BERGER, P. GAUDUCHON, E. MAZET, Le spectre d'une variété Riemannienne, *Lectures Notes in Mathematics* 194, Springer-Verlag 1971.
- [16] N. Boccara, *Analyse Fonctionnelle*, Paris.
- [17] N. Burq and M. Zworski, Geometric control in the presence of a black box, *J. Amer. Math. Soc.*, 17 (2004), pp. 443-471 (electronic).
- [18] Olivier Lablée, Spectre du laplacien et de l'équation de Schrödinger sur une variété : de la géométrie spectrale à l'analyse semi-classique, *Gazette des Mathématiques*, 2008.
- [19] T. CARLEMAN, Sur la théorie mathématique de l'équation de Schrödinger, *Ark. Mat. Astr. Fys.* 24B 11 :1-7, 1934.
- [20] T. KATO, Schrödinger operators with singular potentials, *Israel J. Math.* 13 : 135-148, 1972.
- [21] Thierry Ramond, *Analyse Semiclassique, Résonances et Contrôle de L'équation de Schrödinger*, Mathématiques, Université Paris Sud, France, 13 avril 2005.
- [22] V. A. KONDRATEV and M.A. SHUBIN, Discreteness of the spectrum for Schrödinger operators on manifolds of bounded geometry, *Proceedings of the conference "Functional Analysis, Partial Differential Equations and Applications" dedicated to the V. G. Maz'ya 60th birthday*, Rostock, 1998.

- [23] V. A. KONDRATEV and M.A. SHUBIN, Conditions for the discreteness of the spectrum for Schrödinger operators on manifolds, *Funct. Anal. and Appl.* 33, 1999.
- [24] W. Hunziker, Distortion analyticity and molecular resonance curves, *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, 45 (1986), pp. 339-358.