



HAL
open science

Théorie spectrale & mécanique quantique

Mathieu Lewin

► **To cite this version:**

Mathieu Lewin. Théorie spectrale & mécanique quantique. Master. Ecole Polytechnique, France. 2019. cel-01935749v1

HAL Id: cel-01935749

<https://hal.science/cel-01935749v1>

Submitted on 27 Nov 2018 (v1), last revised 6 Dec 2021 (v4)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

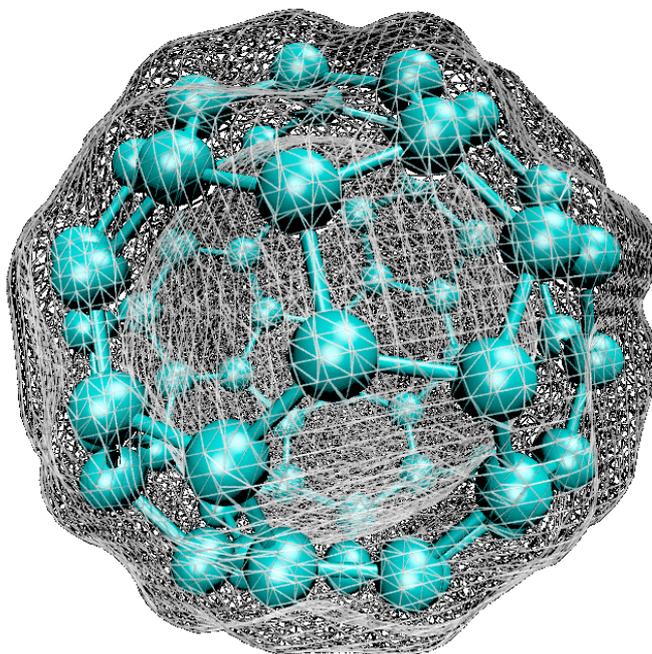
L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Théorie spectrale & mécanique quantique

Mathieu LEWIN

CNRS & CEREMADE, Université Paris-Dauphine, PSL Research University
Mathieu.Lewin@math.cnrs.fr

version du 26 novembre 2018



$$H = - \sum_{j=1}^N \Delta_{x_j} - \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^M \frac{z_m}{|x_j - R_m|} + \sum_{1 \leq j < k \leq N} \frac{1}{|x_j - x_k|}$$

© 2017 Mathieu Lewin. Tous droits réservés.

Image de couverture : © Itamblyn, [Wikipedia/File:C60_isosurface.png](#)

Table des matières

Avant-propos	7
1 Introduction à la mécanique quantique : l'atome d'hydrogène	9
1.1 L'atome d'hydrogène classique	9
1.2 En mécanique quantique	12
1.2.1 Énergie	12
1.2.2 Stabilité	14
1.2.3 État fondamental	17
1.3 Vers la théorie spectrale	19
1.4 L'équation de Schrödinger dépendant du temps	23
1.5 Un théorème général pour une particule	25
1.6 Introduction au formalisme mathématique de la mécanique quantique	38
1.6.1 Système physique, états	38
1.6.2 Observables	39
1.6.3 Évolution du système	40
1.6.4 Réunion de systèmes quantiques	41
1.6.5 Quantification*	42
Exercices complémentaires	44
2 Auto-adjonction	47
2.1 Opérateurs, graphe, extension	47
2.2 Spectre	49
2.3 Fermeture	50
2.4 Adjoint	54
2.5 Symétrie	56
2.6 Auto-adjonction	60
2.7 Impulsion et Laplacien sur \mathbb{R}^d	65
2.8 Impulsion et Laplacien sur $]0, 1[$: réalisations auto-adjointes	66
2.8.1 $P = -id/dx$ sur $]0, 1[$	67
2.8.2 $A = -d^2/dx^2$ sur $]0, 1[$	69
Exercices complémentaires	73

3	Critères d'auto-adjonction : Rellich, Kato & Friedrichs	77
3.1	Perturbations relativement bornées	78
3.1.1	Théorie de Rellich-Kato	78
3.1.2	Application aux opérateurs de Schrödinger	80
3.2	Formes quadratiques et auto-adjonction	82
3.2.1	Définition et fermeture	83
3.2.2	Cas des opérateurs auto-adjoints	86
3.2.3	Exemple du Laplacien sur $]0, 1[$	88
3.2.4	Réalisation de Friedrichs	89
3.3	Formes quadratiques et opérateurs de Schrödinger	93
3.3.1	Cas des potentiels singuliers localement	93
3.3.2	Cas d'un potentiel positif quelconque	95
3.3.3	Systèmes confinés, oscillateur harmonique	96
3.3.4	Laplacien sur un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d *$	101
	Exercices complémentaires	103
4	Théorème spectral et calcul fonctionnel	105
4.1	Opérateurs de multiplication	105
4.2	Théorème spectral	109
4.3	Calcul fonctionnel	112
4.4	Preuve du théorème spectral	117
4.4.1	Construction du calcul fonctionnel continu	117
4.4.2	Preuve du théorème spectral 4.5	120
4.4.3	Preuve du théorème 4.13 (calcul fonctionnel mesurable borné)	123
4.5	Projections spectrales	124
4.6	Équations de Schrödinger, de la chaleur et des ondes	128
4.6.1	Équation de Schrödinger	128
4.6.2	Équation de la chaleur	132
4.6.3	Équation des ondes	133
4.7	Théorème de Stone et groupes de symétrie	134
4.7.1	Théorème de Stone	134
4.7.2	Groupe des translations et quantité de mouvement	136
4.7.3	Groupe des rotations et moment cinétique orbital	138
4.7.4	Action du groupe $SU(2)$ et moment cinétique total	140
4.7.5	Groupe des dilatations et son générateur	142
4.8	Commutateurs et quantités conservées	145
	Exercices complémentaires	147
5	Spectre des opérateurs auto-adjoints	149
5.1	Spectre essentiel et spectre discret	149
5.1.1	Stabilité du spectre discret	149
5.1.2	Caractérisation de Weyl	153
5.2	Opérateurs compacts et à résolvante compacte	157

5.2.1	Opérateurs compacts	157
5.2.2	Opérateurs à résolvante compacte	164
5.3	Théorie de Weyl sur l'invariance du spectre essentiel	170
5.3.1	Perturbations laissant le spectre essentiel invariant	170
5.3.2	Spectre essentiel des opérateurs de Schrödinger	174
5.4	Valeurs propres et formule de Courant-Fischer	175
5.4.1	Formule de Courant-Fischer	175
5.4.2	Principe variationnel pour la somme des valeurs propres	179
5.4.3	Spectre discret des opérateurs de Schrödinger	182
5.5	Un peu d'analyse semi-classique*	187
5.5.1	Valeurs propres du Laplacien dans $\Omega \subset \mathbb{R}^d$	188
5.5.2	Limite semi-classique pour $-\Delta + V$	193
5.5.3	Inégalités de Lieb-Thirring	196
	Exercices complémentaires	196
6	Application : systèmes à N particules, atomes et molécules	201
6.1	Hamiltonien pour N particules, bosons et fermions	201
6.2	Auto-adjonction	206
6.3	Spectre essentiel : théorème HVZ	210
6.4	Particules sans interaction	222
6.5	Atomes et molécules*	228
6.5.1	Existence de valeurs propres, conjecture d'ionisation	229
6.5.2	La limite $N \sim \kappa Z \rightarrow \infty$ pour les atomes	234
	Exercices complémentaires	243
A	Rappels sur les espaces de Sobolev	245
A.1	Définition	245
A.2	Espaces de Sobolev sur l'intervalle $]0, 1[$	246
A.3	Espaces de Sobolev sur \mathbb{R}^d	249
A.4	Trace, relèvement, prolongement	250
A.5	Injections de Sobolev et compacité de Rellich	254
A.6	Régularité elliptique sur un domaine borné*	260
	Exercices complémentaires	262
B	Problèmes	263
B.1	Le potentiel delta	263
B.2	L'atome d'hydrogène pseudo-relativiste	266
	Index	269
	Bibliographie	272

Avant-propos

Ce cours est une introduction à la théorie spectrale des opérateurs auto-adjoints en dimension infinie et à son utilisation dans le cadre de la mécanique quantique.

Si la plupart des outils mathématiques présentés ici sont relativement classiques et peuvent être trouvés dans de nombreux ouvrages [Wei87, RS72, RS75, RS78, CFKS87, Dav95, Dav07, Tes09, Hel13], nous avons choisi d'illustrer ces notions dans le cadre de la physique quantique, dans une présentation intégrée. Historiquement, la théorie des opérateurs auto-adjoints non bornés a justement été développée par von Neumann (rejoint par Riesz, Stone, Weyl et d'autres) à la fin des années 20 [vN32, vN30, Ste73] pour permettre une formulation rigoureuse de la mécanique quantique, inventée quelques années plus tôt. Pour cela, en plus des travaux historiques de Cauchy sur la diagonalisation des matrices, von Neumann a abondamment profité des avancées réalisées par Hilbert sur les premiers systèmes de dimension infinie.¹

En plus des applications en mécanique quantique, nous détaillons de nombreux exemples illustratifs. Une partie de ce cours est tirée de précédentes notes [Lew17] qui étaient plutôt centrées sur les opérateurs à résolvante compacte et sur les différentes réalisations auto-adjointes du Laplacien sur un ouvert borné.

Le cours suppose que le lecteur a déjà la maîtrise des principaux concepts de l'analyse fonctionnelle, de l'intégration de Lebesgue, de la théorie de la mesure, de l'analyse de Fourier et de la théorie des distributions. L'appendice A contient une présentation détaillée des espaces de Sobolev qui jouent un rôle central dans ce cours, mais dont la connaissance préalable n'est pas nécessaire ; les éléments utiles sont introduits ou mentionnés au long de l'exposé. Le lecteur pourra consulter par exemple [Bre94, Bre10, LL01, GLPV18, Gol18, Rem18, DR18] pour combler ses lacunes dans tous ces domaines.

La présentation de la mécanique quantique que nous faisons dans ce cours est assez axiomatique. Nous espérons qu'elle pourra convenir à la

1. Il est amusant que le terme 'spectre' ait été introduit dans ce cadre par Hilbert, mais bien avant l'invention de la mécanique quantique. Il n'était donc dans un premier temps pas reliée au spectre que l'on obtient dans les expériences de spectroscopie en mécanique quantique. Hilbert a lui-même déclaré "*I developed my theory of infinitely many variables from purely mathematical interests, and even called it 'spectral analysis' without any presentiment that it would later find an application to the actual spectrum of physics.*" [Ste73]

fois à ceux qui n'ont pas de notion dans ce domaine, et à ceux qui ont déjà de bonnes connaissances en physique quantique mais qui désirent en savoir plus sur ses aspects rigoureux. Des références classiques de physique sont [LL75, FLS14, CTDL13a, CTDL13b, CTDL17, BD06]. Pour une présentation mathématique, nous renvoyons aussi à [HS96, Tes09, Dim11, Hal13].

Les sections dont le titre est marqué d'une étoile* sont des compléments que le lecteur pressé pourra ignorer s'il le souhaite. Le dernier chapitre contient une présentation de quelques développements de niveau recherche obtenus depuis les années 80, concernant les propriétés mathématiques des atomes et des molécules dans l'approximation de Born-Oppenheimer. C'est un chapitre un peu plus ardu, quoique conçu pour être accessible avec les outils développés dans le cours. Bien sûr, il existe de nombreux autres systèmes quantiques qui posent des questions mathématiques intéressantes et qui peuvent être abordés avec les connaissances acquises ici. Le lecteur intéressé à en savoir plus pourra lire par exemple [RS78, Thi02, LS10, LSSY05].

Chapitre 1

Introduction à la mécanique quantique : l'atome d'hydrogène

Afin d'introduire le sujet principal de ce cours, nous commençons avec le système quantique le plus simple : l'atome d'hydrogène. En plus d'avoir joué un rôle historique extrêmement important dans le développement de la mécanique quantique au début du 20ème siècle, c'est aussi un système possédant des propriétés mathématiques spéciales, puisqu'on peut calculer explicitement toutes les solutions (ce que nous ne ferons pas ici). Nous commençons par rappeler le modèle classique et ses défauts, avant d'introduire le modèle quantique. Des exposés très similaires peuvent être lus dans [Lie90, Lie76, LS10].

1.1 L'atome d'hydrogène classique

L'atome d'hydrogène est composé d'un proton de charge $+e$ et d'un électron de charge $-e$ qui interagissent par le potentiel de Coulomb. Le proton est bien plus lourd que l'électron (d'un facteur 1837) et nous supposons que c'est une particule classique ponctuelle immobile, placée en $0 \in \mathbb{R}^3$. C'est *l'approximation de Born-Oppenheimer* [BO27]. L'électron va lui être décrit par la mécanique quantique, mais nous commençons par rappeler ici le modèle classique.

Rappelons que deux particules chargées interagissent avec le potentiel de Coulomb

$$\frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 |x_1 - x_2|} \quad (1.1)$$

où les q_i et $x_i \in \mathbb{R}^3$ sont, respectivement, la charge et la position des particules en question et ϵ_0 est la constante diélectrique du vide. La force exercée par la particule n° 2 sur la particule n° 1 est donc

$$F_{2 \rightarrow 1} = -\nabla_{x_1} \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 |x_1 - x_2|} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{x_1 - x_2}{|x_1 - x_2|^3}.$$

Le potentiel de Coulomb (1.1) a deux propriétés notables. Tout d'abord il est singulier lorsque $x_1 - x_2 \rightarrow 0$, ce qui décrit le fait que deux particules de charge opposée s'attirent énormément quand elles se rapprochent.

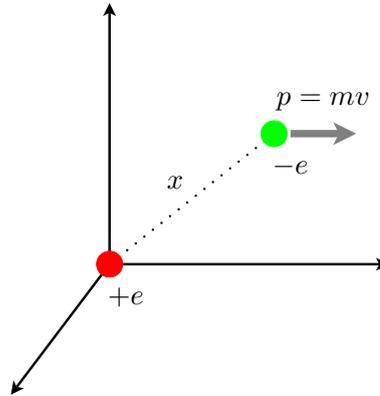


FIGURE 1.1 – L'atome d'hydrogène en mécanique classique.

Comme nous l'expliquons dans cette section, cette divergence à l'origine est la raison première de l'instabilité de l'atome d'hydrogène classique. Mais la décroissance à l'infini du potentiel est aussi un problème important, puisque la fonction $x \mapsto 1/|x|$ tend lentement vers 0 et n'est pas intégrable, en dimension 3. Ainsi, dans un grand système chaque particule n'interagit pas seulement avec ses plus proches voisins, mais également avec toutes les autres particules même éventuellement très lointaines. Ceci génère des problèmes importants de stabilité pour les systèmes comprenant un grand nombre de particules chargées... comme toute la matière autour de nous. Essentiellement, la stabilité est assurée par le fait qu'il y a des charges opposées qui se positionnent de sorte que le système soit aussi neutre que possible localement, de façon à écranter le potentiel et le faire décroître plus rapidement. La preuve que la matière usuelle est stable en ce sens est difficile, même pour le modèle quantique. Elle a généré de nombreux travaux dans les 40 dernières années et a mené à des développements mathématiques intéressants.¹

Mais revenons maintenant à notre atome d'hydrogène classique. L'énergie de l'unique électron est donnée par la somme de son énergie cinétique et de son énergie potentielle d'interaction avec le proton :

$$E(x, p) := \frac{|p|^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|x|}. \quad (1.2)$$

L'instabilité se lit dans la propriété que cette fonction n'est pas minorée, puisqu'on peut faire tendre x vers 0 indépendamment de p qui peut lui rester fixé :

$$\inf_{\substack{x \in \mathbb{R}^3 \\ p \in \mathbb{R}^3}} E(x, p) = -\infty. \quad (1.3)$$

En fait, $E(x, p)$ peut prendre toutes les valeurs possibles entre $-\infty$ et $+\infty$.

1. Nous verrons plus tard à la section 5.5.3 l'exemple des inégalités de Lieb-Thirring.

La propriété que E n'est pas minorée signifie que ce système est physiquement instable, puisqu'on doit imaginer que notre atome est un réservoir infini d'énergie, qu'il peut échanger avec le monde extérieur. L'instabilité ne peut pas se voir simplement lorsqu'on étudie le système isolé. Il faudrait en principe autoriser l'atome à échanger de l'énergie avec un second système, ce que nous ne faisons pas ici car il existe de nombreuses manières différentes de le faire. Nous resterons plutôt à un niveau intuitif.

L'instabilité peut également être formulée dynamiquement. En mécanique classique, l'évolution temporelle du système est décrite par le système Hamiltonien basé sur l'énergie E , c'est-à-dire les équations canoniques de Hamilton :

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \nabla_p E(x(t), p(t)) = \frac{p(t)}{m}, \\ \dot{p}(t) = -\nabla_x E(x(t), p(t)) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{x(t)}{|x(t)|^3}, \end{cases} \quad (1.4)$$

qui fournissent l'équation de Newton

$$m\ddot{x}(t) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{x(t)}{|x(t)|^3}.$$

Les solutions de ces équations sont des coniques, comme la lune qui tourne autour de la terre. L'énergie est conservée le long des trajectoires. Pour décrire l'interaction avec le monde extérieur on peut ajouter une petite perturbation extrêmement petite et quand même faire tomber l'électron sur le noyau, avec $E(x(t), p(t)) \rightarrow -\infty$. Mais ceci ne peut bien sûr pas avoir lieu avec le système non perturbé (1.4).

Pour un système Hamiltonien, les états stationnaires sont les solutions indépendantes du temps, ce qui mène aux équations

$$\begin{cases} \nabla_p E(x, p) = \frac{p}{m} = 0, \\ -\nabla_x E(x, p) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{x}{|x|^3} = 0, \end{cases}$$

qui n'admettent aucune solution. Pour un potentiel V général, un rôle particulier est joué par les points critiques de V (les solutions de l'équation $\nabla V(x) = 0$) qui génèrent tous les états stationnaires du système, et par la dérivée seconde en ces points qui est reliée à leur stabilité dynamique. Ici il n'y en a aucun.

En plus de l'instabilité mentionnée ici, qui a été un problème majeur en physique à la fin du 19ème siècle, il faut aussi savoir que le modèle classique ne décrit pas convenablement les résultats expérimentaux. En effet, si on réalise une expérience de spectroscopie et qu'on observe la lumière émise par un gaz d'hydrogène excité, on trouve un spectre de raies, qui traduisent l'existence d'énergies précises quantifiées entre lesquelles les électrons passent par des procédés d'excitation / désexcitation. Un tel phénomène

pourrait éventuellement être décrit par un potentiel $V(x)$ ayant des points critiques à certaines énergies spéciales, mais certainement pas avec notre potentiel de Coulomb qui n'a aucun point critique.

1.2 En mécanique quantique

1.2.1 Énergie

La raison de l'instabilité de l'atome d'hydrogène classique est claire. C'est parce qu'il est possible de faire tendre x vers 0 à p fixé, car il n'existe aucun lien entre x et p . Dans un système fictif pour lequel il aurait un lien entre x et p de sorte que $|p| \rightarrow +\infty$ quand $|x| \rightarrow 0$, l'énergie cinétique pourrait compenser la divergence de l'énergie potentielle et rendre l'énergie totale E minorée.

La mécanique quantique est basée sur deux procédés mathématiques principaux :

- (i) Le recours à une *modélisation probabiliste* de l'électron. Ainsi on doit décrire le système par deux mesures de probabilités, disons μ qui décrit la probabilité que l'électron soit en $x \in \mathbb{R}^3$ et ν qui décrit celle qu'il ait une quantité de mouvement $p \in \mathbb{R}^3$. L'énergie est bien sûr alors donnée par

$$\frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |p|^2 d\nu(p) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d\mu(x)}{|x|}.$$

- (ii) L'instauration d'un *lien explicite entre les deux probabilités* μ et ν , qui soit tel que $\int_{\mathbb{R}^3} |p|^2 d\nu(p)$ diverge lorsque $\int_{\mathbb{R}^3} |x|^{-1} d\mu(x)$ diverge (ce qui correspond à concentrer une partie de μ en 0).

Il est évident que l'étape (i) seule ne résout rien du tout, puisqu'on peut toujours prendre $\mu = \delta_x$ et $\nu = \delta_p$, ce qui nous ramène au modèle précédent.

Le lien entre μ et ν est par définition donné par la *fonction d'onde* qui est une fonction $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ (à valeurs complexes et de carré intégrable) telle que $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx = 1$. Il est alors postulé que

- $\mu(x) = |\psi(x)|^2$ est la densité de probabilité que l'électron soit en $x \in \mathbb{R}^3$;
- $\nu(p) = |\widehat{\psi}(p)|^2$ est la densité de probabilité qu'il ait une quantité de mouvement $p \in \mathbb{R}^3$.

Ici $\widehat{\psi}$ est la transformée de Fourier de ψ qui est définie par

$$\widehat{\psi}(p) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(x) e^{-i\frac{x \cdot p}{\hbar}} dx, \quad (1.5)$$

pour un nombre \hbar appelé la *constante de Planck* et qui doit être déterminé expérimentalement. La définition (1.5) est choisie de sorte que la transformée de Fourier soit une isométrie, afin que ν soit une probabilité.

Remarque 1.1 (Spin). *L'électron est un fermion de spin 1/2 et il faudrait en principe tenir compte du spin, ce qui revient à ajouter une variable $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ et à travailler avec $\psi(x, \sigma) \in L^2(\mathbb{R}^3 \times \{\uparrow, \downarrow\}, \mathbb{C}) \simeq L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$. En l'absence de champ magnétique, nous pouvons négliger le spin pour simplifier l'exposé.*

Rappelons qu'une fonction très concentrée en espace a une transformée de Fourier très étalée. Par exemple la transformée de Fourier de $\varepsilon^{-3/2}f(x/\varepsilon)$ qui est concentrée à l'échelle ε (f est une fonction fixe de $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$) est juste $(\varepsilon/\hbar)^{3/2}\widehat{f}(\varepsilon p/\hbar)$ qui est étalée à l'échelle \hbar/ε . Ainsi, le lien recherché en (ii) entre position et vitesse est réalisé par la transformée de Fourier et c'est la valeur de la constante \hbar qui détermine l'amplitude de ce lien. À la limite $\hbar \rightarrow 0$ le lien disparaît.

Il est commode d'exprimer l'énergie du système à l'aide de ψ , ce qui mène à l'expression

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |p|^2 |\widehat{\psi}(p)|^2 dp - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx \quad (1.6)$$

Les deux variables $(x, p) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ ont été remplacées par une seule variable ψ vivant dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ de dimension infinie. On peut faire tendre l'énergie potentielle vers sa valeur classique $-e^2/4\pi\varepsilon_0|x|$ en prenant $|\psi|^2$ très proche de la delta δ_x . On peut aussi faire tendre l'énergie cinétique vers $|p|^2/2m$ en prenant $|\widehat{\psi}|^2 \simeq \delta_p$. Mais il est impossible de faire les deux à la fois.

En utilisant le fait que $p\widehat{\psi}(p) = -i\hbar\widehat{\nabla\psi}(p)$ et le théorème de Plancherel $\|\psi\|_{L^2} = \|\widehat{\psi}\|_{L^2}$, nous obtenons une expression faisant uniquement intervenir $\psi(x)$:

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx. \quad (1.7)$$

Nous allons maintenant simplifier la forme de l'énergie en nous plaçant dans le système des *unités atomiques*. Nous faisons le changement de variable

$$x = (4\pi\varepsilon_0\hbar^2/me^2)x', \quad \mathcal{E} = (m/\hbar^2)(e^2/4\pi\varepsilon_0)^2\mathcal{E}'$$

(ce qui change également la fonction ψ) et obtenons l'énergie suivante, notée encore \mathcal{E} pour simplifier :

$$\boxed{\mathcal{E}(\psi) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx.} \quad (1.8)$$

Nous avons donc $e^2/4\pi\varepsilon_0 = \hbar^2/m = 1$ et il est alors commode d'utiliser la définition suivante de la transformée de Fourier

$$\boxed{\widehat{\psi}(p) := \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(x) e^{-ix \cdot p} dx,} \quad (1.9)$$

ce que nous ferons dans tout le cours.

La disparition totale des paramètres physiques est possible car les deux termes de l'énergie ont des homogénéités différentes. Le terme $\int |\nabla\psi|^2$ est l'inverse du carré d'une distance² alors que l'énergie potentielle est l'inverse d'une distance. Si on remplace $1/|x|$ par $1/|x|^2$ (ou le Laplacien par un opérateur différentiel d'ordre un) on ne peut faire totalement disparaître les constantes physiques.

Pour avoir une énergie cinétique finie, il semble naturel de travailler dans l'espace de Sobolev

$$H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \nabla\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})\}$$

où nous rappelons que $\nabla\psi$ est ici compris au sens des distributions. Nous renvoyons à l'appendice A, qui contient un rappel des propriétés les plus importantes des espaces de Sobolev. Il reste à vérifier que l'énergie potentielle fait sens dans cet espace et à prouver la stabilité du système, ce que nous faisons à la section suivante.

Dans toute la suite du cours nous utiliserons fréquemment la notation $L^2(\mathbb{R}^d)$, $H^1(\mathbb{R}^d)$, etc, sans préciser que les fonctions sont à valeurs complexes, ce que nous supposons toujours. Lorsque le contexte est clair, nous écrirons même parfois L^2 , H^1 , etc. Nous écrirons $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$, $H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$, etc, si les fonctions sont supposées à valeurs réelles.

1.2.2 Stabilité

Nous allons maintenant prouver que l'atome d'hydrogène est stable en mécanique quantique, en utilisant des inégalités fonctionnelles classiques.

Proposition 1.2 (Stabilité de l'atome d'hydrogène classique). *La fonctionnelle \mathcal{E} est bien définie et continue sur $H^1(\mathbb{R}^3)$. Il existe une constante universelle C telle que*

$$\mathcal{E}(\psi) \geq C$$

pour tout $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ avec $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 = 1$.

Il existe de nombreuses preuves possibles de la proposition 1.2. Plus loin nous en donnerons une extrêmement simple qui permet même d'identifier précisément la valeur de l'infimum et du minimiseur correspondant, mais qui ne fonctionne que pour le potentiel $1/|x|$. Ici nous utilisons une preuve plus générale qui s'adapte à de multiples situations, par exemple lorsque V n'est pas exactement égal à $1/|x|$.

Nous utiliserons l'inégalité de Sobolev suivante, rappelée et démontrée plus loin au théorème A.10 à l'appendice A.

2. C'est car $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx = 1$ donc $|\psi(x)|^2$ se comporte comme l'inverse du cube d'une distance pour compenser le dx .

Théorème 1.3 (Inégalité de Sobolev en dimension $d = 3$). Soit $\psi \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$ telle que $\nabla\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ et telle que l'ensemble $\{|\psi(x)| \geq M\}$ soit de mesure finie pour tout $M > 0$. Alors $\psi \in L^6(\mathbb{R}^3)$ et on a

$$\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^6 dx \right)^{1/3} \leq S_3 \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx \quad (1.10)$$

où $S_3 = (4/3)2^{-2/3}\pi^{-4/3}$ est la meilleure constante possible dans cette inégalité.

Remarque 1.4. Nous avons mis ici des hypothèses assez faibles sur ψ car il n'est pas très naturel de supposer que $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, puisque la norme $L^2(\mathbb{R}^3)$ n'apparaît pas dans l'inégalité. Pour $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ comme c'est notre cas, les ensembles $\{|\psi| \geq M\}$ sont évidemment de mesure finie puisque

$$|\{|\psi| \geq M\}| = \int_{\{|\psi| \geq M\}} dx \leq \frac{1}{M^2} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

L'inégalité de Sobolev (1.10) est une manière de décrire la façon dont l'énergie cinétique d'une fonction doit exploser lorsqu'elle se concentre en espace. La norme $L^6(\mathbb{R}^3)$ est très naturelle ici, car elle a la même homogénéité que l'énergie cinétique (lorsqu'elle est mise à la puissance 1/3). Pour le voir on peut insérer une fonction dilatée $\psi(x/\varepsilon)$ et vérifier que les deux termes se comportent en ε^{-2} . De façon équivalente, on peut juste compter les unités de longueur (les “ dx ”) dans chaque terme de l'inégalité. Comme $dx \sim L^3$ et $\nabla \sim L^{-1}$, le terme de droite se comporte en $|\psi|^2 L$ et celui de gauche en $(|\psi|^6 L^3)^{1/3} = |\psi|^2 L$. En fait une inégalité comme (1.10) ne pourrait être vraie pour une autre puissance $p \neq 6$ car on arriverait à une contradiction en dilatant la fonction ψ .

On doit penser que l'inégalité de Sobolev (1.10) est une forme de *principe d'incertitude d'Heisenberg* qui fournit une contrainte entre position et vitesse. L'inégalité usuelle d'Heisenberg prend une forme différente et elle s'énonce d'habitude sous la forme

$$\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx \right)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |x|^2 |\psi(x)|^2 dx \right)^{1/2} \geq \frac{3}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx \quad (1.11)$$

(ou une version similaire avec la variance). Malheureusement, il ne semble pas exister de preuve mathématique de la stabilité de l'atome d'hydrogène, qui soit uniquement basée sur cette inégalité. La raison est qu'elle fournit la borne inférieure suivante sur l'énergie cinétique

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx \geq \frac{9}{4} \frac{\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx \right)^2}{\int_{\mathbb{R}^3} |x|^2 |\psi(x)|^2 dx}. \quad (1.12)$$

Il est naturel de chercher à minorer le terme de droite par $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 / |x|^2 dx$, qui possède la bonne homogénéité. Mais, par Cauchy-Schwarz, c'est l'inégalité inverse qui est vraie :

$$\frac{\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx\right)^2}{\int_{\mathbb{R}^3} |x|^2 |\psi(x)|^2 dx} \leq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|^2} dx$$

et on ne peut alors pas conclure.

S'il semble difficile d'utiliser l'inégalité (1.12) dans notre contexte, il est peut-être plus naturel de se demander si l'énergie cinétique peut être directement minorée par $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 |x|^{-2} dx$. Cette inégalité est vraie, comme l'a prouvé Hardy :

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx \geq \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|^2} dx. \quad (1.13)$$

L'inégalité (1.13) implique donc l'inégalité de Heisenberg (1.11) (mais avec une constante différente). Elle peut aussi être utilisée pour prouver la stabilité de l'atome d'hydrogène. La preuve de l'inégalité (1.13) et des détails sur son utilisation pour l'atome d'hydrogène peuvent être trouvés plus loin à l'exercice 1.31.

Revenons maintenant à la preuve de la stabilité de l'atome d'hydrogène basée sur l'inégalité de Sobolev.

Preuve de la proposition 1.2 avec l'inégalité de Sobolev (1.10). L'idée est de traiter à part la singularité à l'origine en coupant l'intégrale de la façon suivante, pour $r > 0$:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx = \int_{|x| \leq r} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx + \int_{|x| > r} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx.$$

En dehors de la boule de rayon r , nous estimons simplement $1/|x|$ par r^{-1} comme suit :

$$\int_{|x| > r} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx \leq r^{-1} \int_{|x| > r} |\psi(x)|^2 dx \leq r^{-1} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx.$$

On borne ensuite l'énergie potentielle à l'intérieur de la boule en utilisant l'inégalité de Hölder (nous prenons $1/|x|$ à la puissance $3/2$ et $|\psi|^2$ à la puissance 3 pour faire apparaître la norme L^6) :

$$\begin{aligned} \int_{|x| \leq r} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx &\leq \left(\int_{|x| \leq r} \frac{dx}{|x|^{3/2}}\right)^{2/3} \left(\int_{|x| \leq r} |\psi(x)|^6 dx\right)^{1/3} \\ &\leq \left(4\pi \int_0^r \sqrt{s} ds\right)^{2/3} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^6 dx\right)^{1/3} \\ &\leq (8\pi/3)^{2/3} S_3 r \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi(x)|^2 dx. \end{aligned}$$

À la dernière ligne nous avons utilisé l'inégalité de Sobolev (1.10). En conclusion nous avons montré que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx \leq \kappa r \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi(x)|^2 dx + r^{-1} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx \quad (1.14)$$

avec $\kappa := (8\pi/3)^{2/3} S_3 \simeq 0.753$. Maintenant nous prenons $r = 1/(2\kappa)$ et obtenons

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx \leq \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi(x)|^2 dx + 2\kappa \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx. \quad (1.15)$$

L'estimée (1.15) montre que l'application linéaire $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3) \mapsto \psi|x|^{-1/2} \in L^2(\mathbb{R}^3)$ est bornée, donc continue. Ainsi, l'énergie \mathcal{E} est continue sur $H^1(\mathbb{R}^3)$ et

$$\mathcal{E}(\psi) \geq -2\kappa \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx \simeq -1.506 \quad \text{pour} \quad \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 = 1,$$

ce qui conclut la preuve de la proposition 1.2. \square

1.2.3 État fondamental

Nous avons vu que l'énergie de l'électron quantique dans l'atome d'hydrogène était minorée (pour des fonctions d'onde ψ normalisées dans L^2). L'étape suivante est l'étude de l'existence d'un minimiseur, appelé *état fondamental*. Le théorème suivant fournit la valeur exacte du minimum de \mathcal{E} ainsi que l'unicité du minimiseur associé.

Théorème 1.5 (État fondamental de l'atome d'hydrogène). *L'infimum de \mathcal{E} sur la sphère de $L^2(\mathbb{R}^3)$ est un minimum, donné par*

$$\min_{\substack{\psi \in H^1(\mathbb{R}^3) \\ \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 = 1}} \mathcal{E}(\psi) = -\frac{1}{2}. \quad (1.16)$$

Les minimiseurs correspondants sont tous sous la forme

$$\psi(x) = \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{\pi}} e^{-|x|}, \quad \theta \in \mathbb{R}. \quad (1.17)$$

Le minimiseur est donc unique, à une phase près. Ce minimiseur appartient à $H^2(\mathbb{R}^3)$ et résout l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{|x|} \right) \psi = -\frac{1}{2} \psi \quad (1.18)$$

où chaque terme est dans $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Ici $\Delta = \sum_{i=1}^3 \partial_{x_i}^2$ est le Laplacien. Nous verrons plus tard à la remarque 1.26 que les fonctions (1.17) sont aussi les seules solutions positives de l'équation (1.18) telles que $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$.

La preuve suivante est basée sur une astuce inspirée de la preuve de l'inégalité de Hardy (1.13) qui est le sujet de l'exercice 1.31.

Démonstration. Pour $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ nous calculons

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \left| \nabla \psi(x) + \frac{x}{|x|} \psi(x) \right|^2 dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi(x)|^2 dx + 2\Re \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi(x)} \frac{x}{|x|} \cdot \nabla \psi(x) dx + \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx. \end{aligned}$$

En intégrant par parties nous trouvons

$$\begin{aligned} 2\Re \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi(x)} \frac{x}{|x|} \cdot \nabla \psi(x) dx &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{x}{|x|} \cdot \nabla |\psi|^2(x) dx \\ &= - \sum_{k=1}^3 \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 \partial_{x_k} \left(\frac{x_k}{|x|} \right) dx \\ &= -2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx. \end{aligned}$$

Ainsi, nous avons

$$\begin{aligned} 0 &\leq \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \left| \nabla \psi(x) + \frac{x}{|x|} \psi(x) \right|^2 dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Avec un argument de densité on peut vérifier que la relation (1.19) reste valide dans $H^1(\mathbb{R}^3)$. Nous pouvons réécrire (1.19) de la façon suivante :

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \left| \nabla \psi(x) + \frac{x}{|x|} \psi(x) \right|^2 dx - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx. \quad (1.20)$$

Ceci montre que l'infimum de \mathcal{E} (avec la contrainte de normalisation sur ψ) est au moins égal à $-1/2$. Nous pouvons rendre $\mathcal{E}(\psi)$ égal à $-1/2$ en annulant le premier terme, c'est-à-dire en trouvant toutes les fonctions $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ telles que

$$\nabla \psi(x) = -\frac{x}{|x|} \psi(x) \quad (1.21)$$

pour presque tout $x \in \mathbb{R}^3$. Il est facile de voir que $\psi(x) = \pi^{-1/2} e^{-|x|}$ vérifie cette propriété et appartient à $H^2(\mathbb{R}^3)$ (donc à $H^1(\mathbb{R}^3)$). Par ailleurs, la constante $\pi^{-1/2}$ a précisément été choisie pour qu'elle soit normalisée

dans $L^2(\mathbb{R}^3)$. Nous concluons donc que l'infimum est un minimum et qu'il vaut exactement $-1/2$. On peut finalement vérifier par le calcul que $\psi = \pi^{-1/2} e^{-|x|}$ est solution de l'équation de Schrödinger (1.18).

Pour l'unicité, on utilise que si $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ vérifie (1.21), alors la fonction $\eta(x) := e^{|x|}\psi(x)$ appartient à $H_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}^3)$ (elle n'est pas forcément de carré intégrable à l'infini) et vérifie $\nabla\eta(x) = 0$ presque partout, donc au sens des distributions. Les seules solutions de cette équation sur \mathbb{R}^d sont les solutions constantes, $\eta(x) = c$, ce qui démontre bien que les solutions de (1.21) dans $H^1(\mathbb{R}^3)$ sont toutes sous la forme $ce^{-|x|}$. Comme nous considérons uniquement des fonctions normalisées dans $L^2(\mathbb{R}^3)$, on doit avoir $|c| = 1/\sqrt{\pi}$, c'est-à-dire $c = \pi^{-1/2}e^{i\theta}$. \square

Exercice 1.6. *Écrire le calcul montrant que ψ est dans $H^2(\mathbb{R}^3)$ et est une solution de (1.18).*

Nous pouvons transformer notre information sur la valeur de l'énergie fondamentale de l'atome d'hydrogène en une inégalité, en suivant les idées de Kato [Kat51].

Corollaire 1.7 (Inégalité de Kato). *Nous avons*

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x-R|} dx \leq \eta \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx + \frac{1}{4\eta} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx, \quad (1.22)$$

pour tout $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$, tout $R \in \mathbb{R}^3$ et tout $\eta > 0$.

Démonstration. Pour $R = 0$ et $\eta = 1/2$, c'est exactement notre inégalité sur l'énergie fondamentale de l'atome d'hydrogène

$$\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx \geq -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx.$$

Nous pouvons obtenir (1.22) pour tout $\eta > 0$ et tout $R \in \mathbb{R}^3$ en appliquant cette inégalité à la fonction dilatée et translatée $(2\eta)^{3/2}\psi(2\eta x + R)$. Il suffit alors d'effectuer les changements de variables appropriés. \square

1.3 Vers la théorie spectrale

Nous avons vu au théorème 1.5 que le minimiseur de l'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène est unique (à une phase près et sous la contrainte $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1$) et résout l'équation

$$H\psi = -\frac{1}{2}\psi,$$

où H est l'opérateur

$$H := -\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{|x|}, \quad (1.23)$$

appelé *Hamiltonien*. Ce n'est pas une grande surprise. Si ψ est assez régulière, par exemple $\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$, on peut intégrer par parties l'énergie cinétique et obtenir

$$\mathcal{E}(\psi) = \left\langle \psi, \left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{|x|} \right) \psi \right\rangle \quad (1.24)$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire usuel de $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\langle f, g \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} \overline{f(x)} g(x) dx.$$

Nous voyons donc que \mathcal{E} n'est rien d'autre que la forme quadratique associée à l'opérateur $H = -\Delta/2 - 1/|x|$. Or, rappelons que pour toute matrice hermitienne A de taille $d \times d$, la plus petite valeur propre de A s'obtient par la formule variationnelle

$$\lambda_1(A) = \min_{\|x\|=1} \langle x, Ax \rangle_{\mathbb{C}^d}.$$

De façon similaire, on s'attend donc ici à ce que $-1/2$ soit la première valeur propre de l'opérateur $H = -\Delta/2 - 1/|x|$. Il faut cependant donner un sens rigoureux à cette assertion, et c'est l'objectif principal de ce cours.

Notons que l'on peut trouver l'opérateur $H = -\Delta/2 - 1/|x|$ directement à partir de l'énergie classique $E(x, p) = |p|^2/2 - 1/|x|$ en remplaçant p par $-i\nabla$, un procédé appelé (première) quantification et qui est ici réalisé par la transformée de Fourier. Nous y reviendrons rapidement un peu plus tard à la section 1.6.5.

Remarque 1.8. *Que ce soit dans \mathbb{C}^d ou en dimension infinie, on peut voir les solutions de l'équation $H\psi = \lambda\psi$ comme les points critiques de la forme quadratique $\langle \psi, H\psi \rangle$ sur la sphère unité $\{\|\psi\| = 1\}$. En effet, le gradient de cette fonctionnelle est (au moins formellement) $2H\psi$ mais comme on travaille sur la sphère, ce gradient doit être projeté sur l'espace tangent à la sphère en ψ , qui est $\{\psi\}^\perp$. Ainsi, l'équation $H\psi \in \mathbb{C}\psi$ qui équivaut à $H\psi = \lambda\psi$, consiste juste à dire que ψ est un point critique de \mathcal{E} sur la sphère unité.*

Sans avoir recours à la théorie spectrale, on peut énoncer le théorème suivant, que nous ne démontrerons pas ici.

Théorème 1.9 (Spectre de l'atome d'hydrogène). *Les solutions non nulles $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ de l'équation*

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{|x|} \right) \psi = \lambda \psi \quad (1.25)$$

au sens des distributions sur \mathbb{R}^3 , sont toutes dans $H^2(\mathbb{R}^3)$ et existent si et seulement si

$$\lambda = -\frac{1}{2n^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*. \quad (1.26)$$

Nous retrouvons ici le célèbre spectre de l'atome d'hydrogène. Les énergies très spéciales, quantifiées, correspondent aux états stationnaires entre lesquels l'électron peut naviguer en fonction de l'énergie qu'il échange avec le monde extérieur. La solution ψ correspondant à $\lambda = -1/2$ est appelé *état fondamental*, alors que les suivantes sont appelées *états excités*.

Exercice 1.10. *En utilisant l'inégalité de Hardy (1.13), montrer que si $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ satisfait l'équation (1.25), alors $\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$.*³

La théorie spectrale que nous allons développer en détails dans ce cours permet de prouver que les $\lambda < 0$ possibles sont forcément quantifiés et tendent vers 0. Par contre, pour montrer la formule explicite (1.26) il faut calculer ces valeurs propres explicitement, ce qui est un peu fastidieux et que nous ne ferons pas ici. Le calcul est basé sur le fait que le modèle est invariant par rotations autour de l'origine $0 \in \mathbb{R}^3$, ce qui permet de se ramener à travailler dans les sous-espaces propres du moment angulaire (section 4.7.3) [Tes09, Hal13, BLR12]. À la fin, on se ramène à une équation différentielle ordinaire pour la partie radiale de ψ , sous la forme

$$-\frac{1}{2}f''(r) - \frac{1}{r}f'(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2}f(r) - \frac{1}{r}f(r) = \lambda f(r)$$

où $\ell \in \mathbb{N}$, équation qu'il faut ensuite résoudre explicitement. Il faut ici déterminer les valeurs possibles de $f(0)$ ou $f'(0)$ de sorte que l'unique solution, donnée par le théorème de Cauchy-Lipschitz, tende vers 0 à l'infini pour que la fonction correspondante soit dans $L^2(\mathbb{R}^3)$.⁴

Le fait qu'il ne puisse pas y avoir de valeur propre positive ou nulle suit de l'*identité du Viriel*⁵ qui stipule que toute solution $H^1(\mathbb{R}^3)$ de l'équation (1.25) doit nécessairement satisfaire

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx, \quad (1.27)$$

ce qui implique immédiatement

$$\lambda = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx = -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx < 0.$$

Il ne peut donc pas y avoir de valeur propre positive ou nulle. L'identité du Viriel (1.27) peut s'obtenir en multipliant l'équation par $(3/2)\overline{\psi(x)} +$

3. Nous montrerons plus tard à la section 3.1 du chapitre 3 qu'il suffit en fait de supposer que $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ pour en déduire que $\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$.

4. Si $\ell = 0$ on prend toujours $f'(0) = 0$ et on doit déterminer $f(0)$. Ceci vient du fait que le secteur $\ell = 0$ correspond aux fonctions radiales dans \mathbb{R}^3 , qui sont paires. Par contre, si $\ell \geq 1$ on doit considérer $f(0) = 0$ et varier $f'(0)$ car le terme $\ell(\ell+1)/r^2$ diverge trop vite à l'origine.

5. La relation (1.27) est parfois aussi appelée *identité de Pohožaev*, du nom de celui qui semble avoir été l'un des premiers à l'utiliser pour étudier des équations non linéaires [Poh65].

$x \cdot \nabla \overline{\psi(x)}$ et en intégrant par parties. Ceci requiert de vérifier que tous les termes font sens dans $H^1(\mathbb{R}^3)$, ce que nous ne discuterons pas ici. Nous y reviendrons plus tard à la section 4.7.5.

Exercice 1.11 (Viriel/Pohožaev). *En supposant que ψ est suffisamment régulière et tend vers 0 suffisamment vite à l'infini, de sorte que tout fasse sens, écrire le calcul menant à l'identité du Viriel (1.27) en multipliant l'équation aux valeurs propres (1.25) par la fonction $(3/2)\overline{\psi(x)} + x \cdot \nabla \overline{\psi(x)}$ et en intégrant par parties.*

La relation (1.27) peut aussi être vue comme une condition de stationnarité dans une direction particulière, celle correspondant à appliquer des petites dilatations à ψ . Considérons en effet la fonction $\psi_\alpha(x) = \alpha^{3/2}\psi(\alpha x)$ avec $\alpha > 0$. Après changement de variable, on trouve que l'énergie de ψ_α vaut

$$\mathcal{E}(\psi_\alpha) = \frac{\alpha^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi(x)|^2 dx - \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx.$$

Comme ψ_α appartient à la sphère unité pour tout α et que ψ est un état stationnaire, on doit nécessairement avoir

$$\frac{d}{d\alpha} \mathcal{E}(\psi_\alpha)|_{\alpha=1} = 0,$$

ce qui fournit précisément (1.27). Un calcul plus explicite de la dérivée fournit

$$\frac{d}{d\alpha} \mathcal{E}(\psi_\alpha)|_{\alpha=1} = 2\Re \left\langle \left(\frac{d}{d\alpha} \psi_\alpha \right) \Big|_{\alpha=1}, H\psi \right\rangle = 0$$

où, bien sûr,

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\alpha} \psi_\alpha \right) \Big|_{\alpha=1} (x) &= \left(\frac{3\alpha^{1/2}}{2} \psi(\alpha x) + \alpha^{3/2} x \cdot \nabla \psi(\alpha x) \right) \Big|_{\alpha=1} \\ &= \frac{3}{2} \psi(x) + x \cdot \nabla \psi(x) \end{aligned}$$

et c'est pour cette raison qu'il faut intégrer l'équation contre cette fonction. En d'autres termes, étudier les petites variations de ψ sous l'action des dilatations revient à regarder la dérivée directionnelle dans la direction $(3/2)\psi + x \cdot \nabla \psi$. Nous en reparlerons à la section 4.7.5 du chapitre 4.

Après plusieurs chapitres nous pourrions montrer que le spectre a la forme donnée à la figure 1.2. Il n'est pas constitué seulement de valeurs propres négatives, mais contient également du spectre continu sur tout l'intervalle $[0, \infty)$, typique de la dimension infinie. On doit imaginer ce spectre continu comme des "quasi valeurs propres" au sens où on peut fabriquer une suite $(\psi_n) \subset H^2(\mathbb{R}^3)$ avec $\|\psi_n\| = 1$, qui résout presque l'équation (1.25), mais telle que $\psi_n \rightarrow 0$ faiblement, de sorte qu'un passage à la limite ne fournit aucune solution non triviale de (1.25). Rappelons qu'il n'y a aucune valeur propre positive ou nulle.

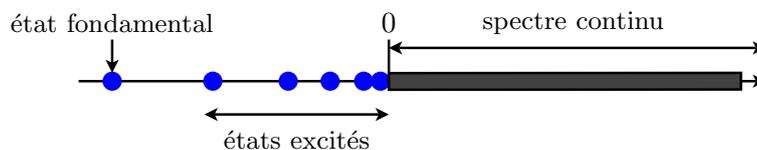


FIGURE 1.2 – Forme du spectre du Hamiltonien décrivant l'électron quantique dans l'atome d'hydrogène et, plus généralement, une grande classe d'opérateurs sous la forme $H = -\Delta + V(x)$.

Exercice 1.12 (Valeurs propres approchées). Soit $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ telle que $\int_{\mathbb{R}^3} |\chi|^2 = 1$. On considère la suite de fonctions

$$\psi_n(x) = e^{ik \cdot x} n^{-3/2} \chi(x/n).$$

Montrer que

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{|x|} - \frac{|k|^2}{2} \right) \psi_n \rightarrow 0$$

fortement dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ et que $\psi_n \rightarrow 0$ faiblement dans $H^2(\mathbb{R}^3)$. Inversement, montrer que si $\lambda < 0$, il n'existe aucune suite $(\psi_n) \subset H^2(\mathbb{R}^3)$ telle que $\|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1$ et $\psi_n \rightarrow 0$ faiblement dans $H^1(\mathbb{R}^3)$ et telle que

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{|x|} - \lambda \right) \psi_n \rightarrow 0$$

fortement dans $L^2(\mathbb{R}^3)$. Ainsi il n'y a aucune "quasi valeur propre" dans $] -\infty, 0[$.

1.4 L'équation de Schrödinger dépendant du temps

Jusqu'à présent nous n'avons parlé que du problème stationnaire. Nous discutons maintenant de l'équation de Schrödinger dépendant du temps.

En principe, cette équation est juste définie comme le système Hamiltonien associé à l'énergie $\mathcal{E}(\psi)$. Ainsi l'énergie sera automatiquement conservée le long des trajectoires. Mais un système Hamiltonien requiert deux variables et une forme symplectique, et le lecteur est peut-être inquiet de voir que nous n'avons qu'une seule variable ψ . Il se trouve que ψ contient bien deux variables puisqu'elle est à valeurs complexes ! Ceci justifie pleinement l'utilisation de fonctions à valeurs complexes dans la théorie, ce qui n'était peut-être pas très clair (et en fait pas tellement indispensable) lors de l'étude du problème indépendant du temps.

Si on écrit $\psi = \psi_1 + i\psi_2$, on trouve immédiatement

$$\mathcal{E}(\psi) = \mathcal{E}(\psi_1) + \mathcal{E}(\psi_2).$$

On peut alors considérer le système Hamiltonien

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \psi_2}(\psi) = 2H\psi_2 \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \psi_1}(\psi) = -2H\psi_1 \end{cases}$$

que l'on peut réécrire en une seule équation sous la forme

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = 2H\psi$$

qui est l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Dans ce formalisme, la forme symplectique est donc donnée par la multiplication par i . On peut bien sûr enlever le facteur 2 changeant d'unité de temps, ce qui fournit la célèbre équation de Schrödinger

$$\boxed{i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi.} \quad (1.28)$$

Un calcul formel montre que la norme L^2 et l'énergie de toute solution est conservée au cours du temps :

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}(\psi(t)) = \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(t, x)|^2 dx = 0.$$

La conservation de la norme L^2 est évidemment cruciale pour que notre interprétation probabiliste de $|\psi|^2$ et $|\hat{\psi}|^2$ persiste pour tout temps le long des trajectoires. Nous étudierons l'équation de Schrödinger rigoureusement à la section 4.6 du chapitre 4.

On peut se demander s'il existe un lien 'formel' entre les équations de Hamilton (1.4) et l'équation de Schrödinger (1.28). Nous travaillons dans un système d'unité où $\hbar = 1$, il ne s'agit pas ici de regarder la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$, pour laquelle on a en effet bien convergence vers les équations de Newton, en un sens approprié. Nous voulons plutôt comprendre le comportement des positions et vitesses moyennes de la solution de Schrödinger. En fait, si nous utilisons les notations abrégées $\langle A \rangle_t = \langle A\psi_t, \psi_t \rangle$ et $p = -i\nabla$, un calcul (formel) montre que

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = \langle p \rangle_t, \\ \frac{d}{dt} \langle p \rangle_t = -\langle \nabla V(x) \rangle_t, \end{cases} \quad (1.29)$$

des équations qui sont habituellement appelées *relations d'Ehrenfest* [Ehr27]. Nous voyons donc que les équations de Hamilton restent d'une certaine manière vraies *en moyenne*, à condition de bien remarquer que

$$\langle \nabla V(x) \rangle_t \neq \nabla V(\langle x \rangle_t)$$

sinon on retrouverait exactement les équations classiques (1.4).

Exercice 1.13. Vérifier la validité de (1.29), en supposant l'existence d'une solution $\psi(t)$ suffisamment lisse et qui décroît suffisamment rapidement pour que tout fasse sens.

Nous terminons cette section par une remarque concernant le lien entre les fonctions propres de l'opérateur H et l'équation dépendant du temps. Le terme "solution stationnaire" est peut-être source de confusion, car si on suppose que ψ est indépendant du temps, on trouve l'équation $H\psi = 0$ et non $H\psi = \lambda\psi$. La raison est que notre modèle est invariant par les "changements de phase", c'est-à-dire par la multiplication par un complexe de module 1 sous la forme $\psi \mapsto e^{i\theta}\psi$. Comme la fonction d'onde ψ n'a pas de réalité physique et que toutes les quantités physiques calculées à partir de ψ sont invariantes par multiplication par $e^{i\theta}$ (nous reviendrons plus longuement sur cet aspect à la section 1.6), nous devrions travailler plutôt *modulo* les phases, c'est-à-dire dans le quotient de la sphère de L^2 par la relation d'équivalence

$$\psi_1 \sim \psi_2 \iff \exists \theta \in \mathbb{R} : \psi_2 = e^{i\theta}\psi_1.$$

Ainsi, lorsque nous disons que ψ est indépendante du temps, nous devons toujours penser "modulo une phase". Ceci revient alors à considérer des fonctions sous la forme $e^{i\theta(t)}\psi$ où ψ ne dépend pas du temps. En injectant dans l'équation (1.28) on trouve

$$H\psi = -\theta'(t)\psi$$

pour tout t . Comme ψ ne peut pas être une fonction propre associée à plusieurs valeurs propres différentes, on en déduit que $\theta'(t) = \lambda$ est constant. Ainsi les solutions stationnaires sont précisément celles sous la forme

$$\psi(t) = e^{-i\lambda t}\psi_0, \quad H\psi_0 = \lambda\psi_0. \quad (1.30)$$

La phase dépend ainsi linéairement du temps, mais ceci ne joue aucun rôle dans notre modélisation, toutes les quantités importantes calculées à partir de ψ seront bien indépendantes du temps.

1.5 Un théorème général pour une particule

Après avoir discuté de l'atome d'hydrogène, nous démontrons maintenant un théorème plus général, couvrant le cas d'une particule quantique dans \mathbb{R}^d (avec $d \geq 1$), soumise à un potentiel extérieur V quelconque, satisfaisant la condition qu'il tend vers 0 à l'infini. C'est-à-dire, nous considérons la fonctionnelle

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla\psi(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|\psi(x)|^2 dx.$$

L'étude réalisée dans cette section est dans le même esprit que [LL01, Chap. 11].

Dans toute cette section nous supposons que

$$V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$$

est une fonction à valeurs réelles, avec

$$\begin{cases} p = 1 & \text{si } d = 1, \\ p > 1 & \text{si } d = 2, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 3. \end{cases} \quad (1.31)$$

Cela signifie qu'on peut écrire $V = V_1 + V_2$ où $V_1 \in L^p(\mathbb{R}^d)$ et $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$. Cette décomposition n'est évidemment pas unique. Les valeurs de p dans (1.31) ont été choisies en fonction des injections de Sobolev, de sorte que le terme d'énergie potentielle fasse sens dans $H^1(\mathbb{R}^d)$. Le lemme suivant contient les propriétés les plus importantes du terme faisant intervenir le potentiel V .

Lemme 1.14 (Énergie potentielle). *Soit $d \geq 1$ et $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec p vérifiant (1.31). Alors $|V(x)|^{1/2}\psi$ appartient à $L^2(\mathbb{R}^d)$ pour tout $\psi \in H^1(\mathbb{R}^d)$. Pour tout $\varepsilon > 0$, il existe une constante C_ε telle que*

$$\begin{aligned} \left| \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|\psi(x)|^2 dx \right| &\leq \int_{\mathbb{R}^d} |V(x)| |\psi(x)|^2 dx \\ &\leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx + C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Si de plus $V \rightarrow 0$ à l'infini, alors l'application

$$\psi \mapsto \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|\psi(x)|^2 dx$$

est faiblement continue. C'est-à-dire, si $\psi_n \rightharpoonup \psi$ faiblement dans $H^1(\mathbb{R}^d)$, alors on a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|\psi_n(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|\psi(x)|^2 dx.$$

Remarque 1.15. *L'énergie potentielle n'est en général pas faiblement continue si $V \rightarrow 0$ à l'infini. Par exemple pour $V = 1$ on trouve simplement $\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx$ qui n'est pas faiblement continu.*

Remarque 1.16. *Si on a $V \in L^q(\mathbb{R}^d)$ avec $q > \max(1, d/2)$ en dimension $d \neq 2$, alors $V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$ où p vérifie (1.31). En effet, on peut écrire $V = V\mathbf{1}(|V| \leq M) + V\mathbf{1}(|V| \geq M)$ avec $V\mathbf{1}(|V| \leq M) \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $V\mathbf{1}(|V| \geq M) \in L^p(\mathbb{R}^d)$, puisque*

$$\int_{|V| \leq M} |V(x)|^p dx \leq M^{q-p} \int_{|V| \leq M} |V(x)|^q dx < \infty.$$

Ainsi, l'hypothèse (1.31) est la plus générale possible dans les espaces de type L^p .

Démonstration. Nous pouvons directement majorer $\int_{\mathbb{R}^d} |V| |\psi|^2$. L'idée est bien sûr d'écrire $V = V_1 + V_2$ et d'estimer les deux termes séparément. Cependant, le lecteur averti aura remarqué que l'exposant choisi pour p va nous amener à faire intervenir l'exposant critique de l'injection de Sobolev, ce qui risque de ne pas permettre d'avoir l'estimée (1.32) avec un ε aussi petit que l'on veut. L'astuce consiste à noter dans un premier temps que l'on peut écrire

$$V_1 = V_1 \mathbf{1}(|V_1| \geq M) + V_1 \mathbf{1}(|V_1| < M)$$

où le second terme est dans $L^\infty(\mathbb{R}^d)$ et peut être ajouté à V_2 , alors que le premier est aussi petit que l'on veut dans $L^p(\mathbb{R}^d)$, puisque par convergence dominée

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \int_{|V_1| \geq M} |V_1(x)|^p dx = 0.$$

En d'autres termes, cet argument montre que les fonctions de $L^p + L^\infty$ avec $1 \leq p < \infty$ peuvent toujours s'écrire $\tilde{V}_1 + \tilde{V}_2$ avec \tilde{V}_1 aussi petit que l'on veut dans L^p . En revenant à notre énergie potentielle, nous obtenons

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} |V(x)| |\psi(x)|^2 dx \\ & \leq \int_{|V_1| \geq M} |V_1(x)| |\psi(x)|^2 dx + \left(M + \|V_2\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \right) \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx \\ & \leq \|V_1 \mathbf{1}(|V_1| \geq M)\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|\psi\|_{L^{2p'}(\mathbb{R}^d)}^2 + \left(M + \|V_2\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \right) \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx, \end{aligned}$$

où $p' = p/(p-1)$ est l'exposant conjugué de p .

En dimension $d \geq 3$, on trouve $2p' = 2d/(d-2)$ qui est l'exposant critique de Sobolev, pour lequel on a l'inégalité similaire à (1.10)

$$\|\psi\|_{L^{\frac{2d}{d-2}}(\mathbb{R}^d)}^2 \leq S_d \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx \quad (1.33)$$

(voir le théorème A.10 à l'appendice A). On a donc prouvé, comme voulu, que

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |V(x)| |\psi(x)|^2 dx & \leq C \|V_1 \mathbf{1}(|V_1| \geq M)\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx \\ & \quad + \left(M + \|V_2\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \right) \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx, \end{aligned}$$

où la constante devant le gradient peut être choisie aussi petite que l'on veut en prenant M très grand.

En dimension $d = 2$, la contrainte $p > 1$ implique que $2p' < \infty$ et on peut alors utiliser l'inégalité sous-critique

$$\|\psi\|_{L^{2p'}(\mathbb{R}^2)} \leq C \left(\|\nabla \psi\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 + \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \right)^{1/2}.$$

En dimension $d = 1$ on a $p = 1$ de sorte que $2p' = \infty$ mais on a bien l'inégalité

$$\|\psi\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq C \left(\|\nabla\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \right)^{1/2}.$$

On trouve donc dans ces deux cas

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |V(x)| |\psi(x)|^2 dx &\leq C \|V_1 \mathbf{1}(|V_1| \geq M)\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla\psi(x)|^2 dx \\ &+ \left(M + \|V_2\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} + C \|V_1 \mathbf{1}(|V_1| \geq M)\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \right) \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx, \end{aligned}$$

qui permet de conclure de la même façon.

Il reste à prouver la continuité faible lorsque $V \rightarrow 0$ à l'infini. Cette fois, l'hypothèse signifie que $\|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B_R)}$ tend vers 0 quand $R \rightarrow \infty$ (ici B_R est la boule centrée en 0 de rayon R). Bien sûr la restriction $V \mathbf{1}_{B_R}$ de V à la boule B_R appartient toujours à $L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Soit donc $\psi_n \rightharpoonup \psi$ une suite qui converge faiblement dans $H^1(\mathbb{R}^d)$. Par les injections de Sobolev, on en déduit que la convergence faible est aussi vraie dans $L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^{2p'}(\mathbb{R}^d)$. Par ailleurs, le théorème A.16 de Rellich-Kondrachov rappelé à l'appendice A implique la convergence forte locale dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui signifie en fait que $\psi_n \rightarrow \psi$ fortement dans $L^q(B_R)$ pour tous $2 \leq q < 2p'$. En dimensions $d = 1$ et $d = 2$, on a même convergence dans $L^{2p'}(B_R)$ car l'exposant est sous-critique. Par contre, la convergence n'est que faible dans $L^{2p'}(B_R)$ en dimension $d \geq 3$. Comme $|\psi_n|^2$ est bornée dans $L^{p'}(B_R)$, elle admet aussi des limites faibles dans cet espace. Mais comme $|\psi_n|^2 \rightarrow |\psi|^2$ fortement dans $L^1(B_R)$, on conclut que l'on a aussi $|\psi_n|^2 \rightharpoonup |\psi|^2$ faiblement dans $L^{p'}(B_R)$. Ceci montre donc que, dans tous les cas, on peut passer à la limite dans l'intégrale sur la boule B_R :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{B_R} V(x) |\psi_n(x)|^2 dx = \int_{B_R} V(x) |\psi(x)|^2 dx$$

car $V \mathbf{1}_{B_R}$ appartient à $L^p(B_R)$, et par définition de la convergence faible.

On peut alors conclure par un 'argument en $\varepsilon/2$ '. C'est-à-dire, on se donne un $\varepsilon > 0$ et on commence par estimer l'intégrale en dehors d'une boule B_R uniformément par rapport n par

$$\begin{aligned} &\left| \int_{\mathbb{R}^d \setminus B_R} V(x) |\psi_n(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^d \setminus B_R} V(x) |\psi(x)|^2 dx \right| \\ &\leq \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B_R)} \left(\|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 + \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \right) \leq C \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B_R)}. \end{aligned}$$

Nous avons utilisé ici que (ψ_n) est bornée dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ donc dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Comme $V \rightarrow 0$ à l'infini par hypothèse, on peut alors choisir R de sorte que

$$\left| \int_{\mathbb{R}^d \setminus B_R} V(x) |\psi_n(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^d \setminus B_R} V(x) |\psi(x)|^2 dx \right| \leq \frac{\varepsilon}{2},$$

pour tout n . Ensuite, pour ce R fixé, on a pour n assez grand

$$\left| \int_{B_R} V(x)|\psi_n(x)|^2 dx - \int_{B_R} V(x)|\psi(x)|^2 dx \right| \leq \frac{\varepsilon}{2},$$

comme nous avons expliqué précédemment. Au total on a bien

$$\left| \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|\psi_n(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|\psi(x)|^2 dx \right| \leq \varepsilon$$

pour n assez grand, comme il fallait démontrer. \square

L'inégalité (1.32) montre immédiatement que \mathcal{E} est bien définie et continue sur $H^1(\mathbb{R}^d)$, avec l'estimée

$$\mathcal{E}(\psi) \geq \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx - C_{1/2} \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx \quad (1.34)$$

en prenant $\varepsilon = 1/2$. Ainsi, le modèle est stable et on peut poser

$$I := \inf_{\substack{\psi \in H^1(\mathbb{R}^d) \\ \int_{\mathbb{R}^d} |\psi|^2 = 1}} \mathcal{E}(\psi).$$

Nous étudions maintenant quand I est un minimum.

Théorème 1.17 (Une particule quantique : existence). *Soit $d \geq 1$ et $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec p vérifiant (1.31) et $V \rightarrow 0$ à l'infini. Alors on a toujours*

$$I \leq 0.$$

• Si $I = 0$, il existe toujours une suite minimisante $(\psi_n) \subset H^1(\mathbb{R}^d)$ telle que $\|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1$ et $\psi_n \rightarrow 0$ faiblement. L'infimum peut être ou ne pas être atteint.

• Si $I < 0$, alors toutes les suites minimisantes convergent fortement dans $H^1(\mathbb{R}^d)$, à sous-suite près. En particulier, l'infimum est un minimum et il existe toujours au moins un minimiseur.

Démonstration. Soit χ une fonction quelconque de $H^1(\mathbb{R}^d)$ telle que $\int_{\mathbb{R}^d} |\chi|^2 = 1$. Considérons la suite de fonctions dilatées

$$\chi_n(x) = n^{-d/2} \chi(x/n).$$

Alors on a $\chi_n \rightarrow 0$ au sens des distributions et, comme

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \chi_n(x)|^2 dx = \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \chi(x)|^2 dx, \quad \int_{\mathbb{R}^d} |\chi_n(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^d} |\chi(x)|^2 dx,$$

la suite χ_n est bornée dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ et on doit donc avoir $\chi_n \rightharpoonup 0$ faiblement dans $H^1(\mathbb{R}^d)$. On en déduit d'après le lemme 1.14 que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\chi_n(x)|^2 dx = 0$$

et donc que $\mathcal{E}(\chi_n) \rightarrow 0$. Par définition de l'infimum ceci montre que $I \leq 0$. Si $I = 0$, cette suite convient pour satisfaire les propriétés de l'énoncé.

Supposons maintenant que $I < 0$ et considérons une suite minimisante (ψ_n) . Nous commençons par remarquer que (ψ_n) est bornée dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ puisque $\|\psi_n\|_{L^2} = 1$ et d'après l'inégalité (1.34). Donc quitte à extraire une sous-suite on peut supposer que $\psi_n \rightharpoonup \psi$ faiblement dans $H^1(\mathbb{R}^d)$. D'après le lemme 1.14 nous en déduisons que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\psi_n(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\psi(x)|^2 dx.$$

En particulier

$$\mathcal{E}(\psi_n) = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi_n(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\psi_n(x)|^2 dx + o(1)_{n \rightarrow \infty}$$

et puisque $\mathcal{E}(\psi_n)$ tend vers I , la norme du gradient $\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi_n(x)|^2 dx$ converge. À cause de la convergence faible on a toujours

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi_n(x)|^2 dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi_n(x)|^2 dx \geq \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx,$$

et

$$1 = \liminf_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} |\psi_n(x)|^2 dx \geq \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx.$$

L'inégalité sur la limite du gradient fournit donc

$$I \geq \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\psi(x)|^2 dx = \mathcal{E}(\psi).$$

Nous pouvons tout de suite remarquer que la limite faible ψ de la suite (ψ_n) ne peut être nulle car sinon on aurait $I \geq 0$, qui contredit l'hypothèse que $I < 0$. Puisque $\psi \neq 0$, nous pouvons alors écrire

$$0 \geq I \geq \mathcal{E}(\psi) = \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \mathcal{E}\left(\frac{\psi}{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}}\right) \geq \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 I.$$

Comme $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq 1$ et $I < 0$ ceci montre que $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1$, donc que $\psi_n \rightarrow \psi$ fortement dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, avec $\mathcal{E}(\psi) = I$. La limite ψ est donc un minimiseur. En revenant aux limite ci-dessus, on trouve aussi que

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi_n(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx,$$

qui implique la convergence forte dans $H^1(\mathbb{R}^d)$. Pour résumer, nous avons bien montré que dans le cas où $I < 0$, toute suite minimisante possède une sous-suite qui converge fortement dans $H^1(\mathbb{R}^d)$, et que les limites possibles sont toutes des minimiseurs. \square

La proposition suivante fournit une condition relativement simple avec laquelle on peut démontrer que $I < 0$, et qui s'applique par ailleurs à l'atome d'hydrogène.

Proposition 1.18 (Existence si $V \sim -|x|^{-\alpha}$ avec $0 < \alpha < 2$). *Si la fonction $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ tend vers 0 à l'infini tout en vérifiant*

$$V(x) \leq -\frac{c}{|x|^\alpha}, \quad \text{pour } |x| \geq R$$

avec $c > 0$ et $0 < \alpha < 2$, alors $I < 0$ et on a donc existence d'un minimum.

Démonstration. Soit $\chi \in C_c^\infty(B_2 \setminus B_1)$ à support dans la couronne située entre les boules de rayon 1 et 2, et telle que $\int_{\mathbb{R}^d} |\chi|^2 = 1$. Nous dilatons χ comme précédemment en définissant $\chi_n(x) = n^{-d/2} \chi(x/n)$. Après changement de variables nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\chi_n) &= \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \chi(x)|^2 dx + \int_{B_2 \setminus B_1} V(nx) |\chi(x)|^2 dx \\ &\leq \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \chi(x)|^2 dx - \frac{c}{n^\alpha} \int_{B_2 \setminus B_1} \frac{|\chi(x)|^2}{|x|^\alpha} dx \end{aligned}$$

qui est négatif pour n assez grand, puisque $0 < \alpha < 2$ donc le terme en $n^{-\alpha}$ est dominant. \square

La condition que $\alpha < 2$ est optimale. Si le potentiel décroît plus vite à l'infini, il est possible d'avoir $I = 0$, même si V est négatif. En fait, il suffit juste que V soit assez petit dans $L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$, en dimension $d \geq 3$.⁶

Proposition 1.19 (Non-existence si V est petit dans $L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$). *En dimension $d \geq 3$, si*

$$\|V\|_{L^{d/2}(\mathbb{R}^d)} < (S_d)^{-1}$$

où S_d est la meilleure constante de Sobolev apparaissant dans (1.33), alors on a $I = 0$ et l'infimum n'est pas atteint.

Démonstration. Comme précédemment, on utilise les inégalités de Hölder et de Sobolev (1.33) pour estimer

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\psi) &\geq \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx - \|V\|_{L^{d/2}(\mathbb{R}^d)} \|\psi\|_{L^{\frac{2d}{d-2}}(\mathbb{R}^d)}^2 \\ &\geq \left(1 - \|V\|_{L^{d/2}(\mathbb{R}^d)} S_d\right) \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx. \end{aligned}$$

6. La situation est plus compliquée en dimensions $d = 1, 2$ où le minimum est toujours atteint si par exemple $V < 0$ partout, quelle que soit sa décroissance [RS78, Thm. XIII.11].

Ceci montre que $\mathcal{E} \geq 0$ donc $I = 0$. Si $\mathcal{E}(\psi) = 0$, alors on doit avoir par l'inégalité précédente $\nabla\psi = 0$ donc $\psi = 0$, qui contredit la contrainte $\int_{\mathbb{R}^d} |\psi|^2 = 1$. Il n'y a donc pas de minimiseur. \square

Il est maintenant temps d'étudier l'unicité du minimiseur, lorsqu'il existe. Nous énonçons un théorème général, mais nous n'en donnerons la preuve complète qu'avec des hypothèses supplémentaires sur V .

Théorème 1.20 (Une particule quantique : unicité). *Soit $d \geq 1$ et $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec p vérifiant (1.31) et $V \rightarrow 0$ à l'infini. Si I est atteint, alors les minimiseurs sont uniques à une phase près. Ils s'écrivent tous sous la forme*

$$e^{i\theta}\psi, \quad \theta \in \mathbb{R}$$

avec $\psi \in H^1(\mathbb{R}^d)$ une fonction strictement positive sur \mathbb{R}^d , qui est solution de l'équation

$$\left(-\Delta + V(x)\right)\psi(x) = I\psi(x) \quad (1.35)$$

au sens des distributions et dans $H^{-1}(\mathbb{R}^d)$.

Remarque 1.21. *L'unicité du minimiseur dans le cas quantique est à mettre en parallèle avec le cas classique, pour lequel il n'y a pas unicité en général. En effet, si une fonction V atteint son minimum en plusieurs points, la fonction $E(x, p) = |p|^2 + V(x)$ possède alors plusieurs minima distincts. L'intuition est que le modèle quantique fournit un minimiseur ψ unique, mais qui sera typiquement localisé dans tous les puits à la fois.*

Démonstration. On suppose que $\psi \in H^1(\mathbb{R}^d)$ avec $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1$ est un minimiseur pour le problème de minimisation I . Nous commençons par montrer que ψ est solution de l'équation (1.35). C'est un argument très général qui consiste juste à dire que \mathcal{E} doit être stationnaire en ψ sur la sphère unité $\{\psi \in H^1(\mathbb{R}^d) : \|\psi\|_{L^2} = 1\}$. Pour cela il n'est pas nécessaire de parler de dérivée en dimension infinie, nous pouvons nous contenter de regarder la dérivée dans une direction, ce qui revient à calculer une dérivée en dimension 1. Soit donc $0 \neq \chi \in H^1(\mathbb{R}^d)$ une fonction quelconque (la direction dans laquelle nous allons calculer la dérivée de l'énergie). Nous définissons alors

$$\psi_\varepsilon = \frac{\psi + \varepsilon\chi}{\|\psi + \varepsilon\chi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}}.$$

Comme $\chi \neq 0$, on a

$$\begin{aligned} \|\psi + \varepsilon\chi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x) + \varepsilon\chi(x)|^2 dx \\ &= 1 + 2\varepsilon\Re \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(x)}\chi(x) dx + \varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\chi(x)|^2 dx \end{aligned}$$

qui ne s'annule pas pour ε assez petit. Ainsi ψ_ε est une fonction bien définie dans $H^1(\mathbb{R}^d)$, qui est normalisée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Maintenant, on écrit que la fonction $\varepsilon \mapsto \mathcal{E}(\psi_\varepsilon)$ atteint son minimum en $\varepsilon = 0$ et donc que sa dérivée s'annule en 0. Le résultat du calcul est :

$$\Re \left(\int_{\mathbb{R}^d} \nabla \overline{\psi(x)} \cdot \nabla \chi(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x) \overline{\psi(x)} \chi(x) dx - I \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(x)} \chi(x) dx \right) = 0. \quad (1.36)$$

Comme l'équation est valable pour tout $\chi \in H^1(\mathbb{R}^d)$, nous pouvons remplacer χ par $i\chi$ et ainsi enlever la partie réelle :

$$\int_{\mathbb{R}^d} \nabla \overline{\psi(x)} \cdot \nabla \chi(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x) \overline{\psi(x)} \chi(x) dx - I \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(x)} \chi(x) dx = 0. \quad (1.37)$$

Comme

$${}_{H^{-1}(\mathbb{R}^d)} \langle -\Delta \psi, \chi \rangle_{H^1(\mathbb{R}^d)} = \langle \nabla \psi, \nabla \chi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

par définition, ceci signifie exactement que ψ résout (1.35) dans $H^{-1}(\mathbb{R}^d)$. Si on se restreint à $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$, on retrouve exactement la définition de la validité de l'équation au sens des distributions.

Il faut maintenant montrer l'unicité à une phase près. La preuve repose sur deux résultats importants. Le premier est le lemme fondamental suivant, tiré de [LL01, Thm 6.17 & Thm. 7.8].

Lemme 1.22 (Convexité des gradients). *Pour tout $f, g \in H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ on a $\sqrt{f^2 + g^2} \in H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec l'inégalité*

$$|\nabla f(x)|^2 + |\nabla g(x)|^2 \geq \left| \nabla \sqrt{f^2 + g^2}(x) \right|^2 \quad (1.38)$$

presque partout. Si $f^2 + g^2 > 0$ sur \mathbb{R}^d , alors on a égalité dans (1.38) pour presque tout $x \in \mathbb{R}^d$, si et seulement si $f = a\sqrt{f^2 + g^2}$ et $g = b\sqrt{f^2 + g^2}$ presque partout, pour des constantes $a, b \in \mathbb{R}$ avec $a^2 + b^2 = 1$.

Nous remarquons que l'inégalité peut être réécrite sous la forme

$$|\nabla F(x)| \geq |\nabla |F|(x)|$$

pour toute fonction $F = f + ig$ à valeurs complexes. En intégrant, elle implique que

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla F(x)|^2 dx \geq \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla |F|(x)|^2 dx, \quad \forall F \in H^1(\mathbb{R}^d). \quad (1.39)$$

Si $|F| > 0$ sur \mathbb{R}^d , le cas d'égalité correspond alors à $F = e^{i\theta}|F|$ pour un $\theta \in [0, 2\pi[$. Rappelons que pour des fonctions mesurables, la condition $f^2 + g^2 > 0$ sur \mathbb{R}^d signifie que pour toute boule B (de centre et rayon quelconque), on a $f^2 + g^2 \geq \varepsilon_B > 0$ presque partout sur B .

Preuve du lemme 1.22. Pour $\varepsilon > 0$, considérons la fonction

$$F_\varepsilon = \sqrt{f^2 + g^2 + \varepsilon^2} - \varepsilon$$

qui vérifie

$$0 \leq F_\varepsilon \leq |f| + |g|$$

donc appartient à $L^2(\mathbb{R}^d)$, et qui converge presque partout (donc au sens des distributions) vers $\sqrt{f^2 + g^2}$. Nous prétendons que F_ε appartient à $H^1(\mathbb{R}^d)$ et que son gradient est la fonction

$$\nabla F_\varepsilon(x) = \frac{f(x)\nabla f(x) + g(x)\nabla g(x)}{\sqrt{f(x)^2 + g(x)^2 + \varepsilon^2}}, \quad (1.40)$$

dont le carré vaut

$$\begin{aligned} |\nabla F_\varepsilon(x)|^2 &= \frac{|f(x)\nabla f(x) + g(x)\nabla g(x)|^2}{f(x)^2 + g(x)^2 + \varepsilon^2} \\ &= |\nabla f(x)|^2 + |\nabla g(x)|^2 - \frac{|g(x)\nabla f(x) - f(x)\nabla g(x)|^2}{f(x)^2 + g(x)^2 + \varepsilon^2} \end{aligned} \quad (1.41)$$

$$\leq |\nabla f(x)|^2 + |\nabla g(x)|^2. \quad (1.42)$$

Pour obtenir toutes ces formules avec l'hypothèse que $f, g \in H^1(\mathbb{R}^d)$ on peut commencer par faire le calcul avec $f, g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et ensuite raisonner par densité. Le terme à droite de (1.40) est bien défini dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ d'après (1.42) et il est continu pour la convergence forte de $H^1(\mathbb{R}^d)$ car cette dernière implique la convergence presque partout par le théorème de Rellich-Kondrachov.

Exercice 1.23. *Montrer la validité des formules (1.40) et (1.41) dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ en utilisant un argument de densité.*

Maintenant nous pouvons prendre $\varepsilon \rightarrow 0$. La suite ∇F_ε est bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ et sa limite $\sqrt{f^2 + g^2}$ au sens des distributions doit donc appartenir à $H^1(\mathbb{R}^d)$, avec l'estimée annoncée

$$|\nabla \sqrt{f^2 + g^2}(x)|^2 \leq |\nabla f(x)|^2 + |\nabla g(x)|^2,$$

presque partout dans \mathbb{R}^d . Plus précisément, en passant à la limite dans (1.41) et en utilisant que

$$\frac{g(x)}{\sqrt{f(x)^2 + g(x)^2 + \varepsilon^2}} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \begin{cases} 0 & \text{sur } \{g = 0\} \\ \frac{g(x)}{\sqrt{f(x)^2 + g(x)^2}} & \text{sur } \{g \neq 0\}, \end{cases}$$

nous obtenons la formule

$$\begin{aligned} |\nabla \sqrt{f^2 + g^2}(x)|^2 &= |\nabla f(x)|^2 + |\nabla g(x)|^2 \\ &\quad - \left| \frac{g(x)\mathbb{1}_{g \neq 0}(x)}{\sqrt{f(x)^2 + g(x)^2}} \nabla f(x) - \frac{f(x)\mathbb{1}_{f \neq 0}(x)}{\sqrt{f(x)^2 + g(x)^2}} \nabla g(x) \right|^2, \end{aligned} \quad (1.43)$$

pour tout $f, g \in H^1(\mathbb{R}^d)$. Lorsque $f^2 + g^2 > 0$, il y a égalité si et seulement si

$$g(x)\mathbb{1}_{g \neq 0}(x)\nabla f(x) = f(x)\mathbb{1}_{f \neq 0}(x)\nabla g(x)$$

pour presque tout $x \in \mathbb{R}^d$, ce qui équivaut à

$$g(x)\nabla f(x) = f(x)\nabla g(x)$$

pour presque tout $x \in \mathbb{R}^d$. Par des arguments similaires à précédemment, on a pour $h = \sqrt{f^2 + g^2}$

$$\nabla \frac{f}{h}(x) = \frac{g(x)}{h(x)^3} (g(x)\nabla f(x) - f(x)\nabla g(x))$$

et

$$\nabla \frac{g}{h}(x) = -\frac{f(x)}{h(x)^3} (g(x)\nabla f(x) - f(x)\nabla g(x)),$$

presque partout sur \mathbb{R}^d . À cause du dénominateur, ces fonctions appartiennent *a priori* seulement à $H_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}^d)$, ce qui est suffisant pour raisonner au sens des distributions. On en déduit bien que $f = ah$ et $g = bh$ avec $a^2 + b^2 = 1$. La réciproque est évidente. \square

Nous aurons besoin d'un deuxième outil très important, que nous n'allons pas démontrer dans tous les détails.

Théorème 1.24 (Principe du maximum fort). *Soit $d \geq 1$ et $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec p vérifiant (1.31). Soit $f \in H^1(\mathbb{R}^d)$ une fonction positive ou nulle, mais non identiquement nulle, telle que $-\Delta f + Vf$ appartient à $L^2(\mathbb{R}^d)$ et est positive ou nulle presque partout :*

$$-\Delta f(x) + V(x)f(x) \geq 0.$$

Alors $f > 0$ partout.

L'intuition du théorème est la suivante. Prenons f une fonction très lisse satisfaisant les hypothèses du théorème, et supposons que f s'annule en x_0 . Alors x_0 est un point de minimum et ainsi la matrice hessienne $\text{Hess}f(x_0)$ est positive, c'est-à-dire n'a que des valeurs propres positives ou nulles. En particulier $\Delta f(x_0) \geq 0$. Mais l'équation implique à l'inverse que $\Delta f(x_0) \leq 0$ car $f(x_0) = 0$, et ainsi $\text{Hess}f(x_0) \equiv 0$. Nous voyons que f doit s'annuler plus vite que prévu en x_0 . Le théorème énonce que l'on peut améliorer l'argument et obtenir $f \equiv 0$ partout, qui contredit l'hypothèse que $f \neq 0$. Évidemment, la preuve est largement compliquée par le fait que f n'est pas lisse car elle est supposée appartenir à $H^1(\mathbb{R}^d)$ seulement. Par ailleurs, le cas d'un V quelconque satisfaisant uniquement les hypothèses du théorème est assez difficile. Nous fournirons ici une preuve plus simple en supposant que

- $Vf \in L^2(\mathbb{R}^d)$ (cette information ne suit pas des hypothèses (1.31) que nous avons faites sur V);
- V est majoré par une constante.

Preuve du théorème 1.24 avec ces hypothèses supplémentaires. Comme on a supposé que $-\Delta f + Vf \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et $Vf \in L^2(\mathbb{R}^d)$, on déduit que $\Delta f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et donc que $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$. Soit $g := -\Delta f + Vf$ qui est une fonction positive de $L^2(\mathbb{R}^d)$. On introduit alors une grande constante $C > 0$ et on écrit l'équation sous la forme

$$(-\Delta + C)f = (C - V)f + g := h. \quad (1.44)$$

Comme nous avons aussi supposé que V est majoré, disons $V \leq M$, nous pouvons prendre $C = M + 1$ de sorte que $(C - V)f \geq f \neq 0$. La fonction $h \in L^2(\mathbb{R}^d)$ est donc positive et non triviale (car f n'est pas nulle par hypothèse). L'équation (1.44) peut être résolue explicitement. En passant en Fourier on trouve $(C + |k|^2)\widehat{f}(k) = \widehat{h}(k)$ et donc

$$f(x) = (2\pi)^{-d/2} \Phi * h(x) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(x-y)h(y) dy \quad (1.45)$$

où Φ est la transformée de Fourier inverse de la fonction $k \mapsto (1 + |k|^2)^{-1}$. En dimension $d = 3$ cette fonction est explicite,

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-\sqrt{C}|x|}}{|x|} > 0$$

et s'appelle le potentiel de Yukawa. En général on peut utiliser par exemple la formule intégrale

$$\frac{1}{1 + |k|^2} = \int_0^\infty e^{-t(1+|k|^2)} dt$$

et la transformée de Fourier des gaussiennes, pour en déduire que

$$\Phi(x) = \frac{2^{-d/2}}{|x|^{d-2}} \int_0^\infty e^{-s|x|^2 - \frac{1}{4s}} \frac{ds}{s^{\frac{d}{2}}}. \quad (1.46)$$

La fonction Φ est intégrable sur tout \mathbb{R}^d , puisque $\Phi \geq 0$ et

$$\int_{\mathbb{R}^d} \Phi(x) dx = (\pi/2)^{d/2} \left(\int_0^\infty e^{-\frac{1}{4s}} \frac{ds}{s^{1+\frac{d}{2}}} \right) \left(\int_{\mathbb{R}^d} \frac{e^{-|x|^2}}{|x|^{d-2}} dx \right) < \infty.$$

Par ailleurs, Φ est strictement positive en dehors de l'origine (elle est même lisse sur $\mathbb{R}^d \setminus \{0\}$). Comme $h \geq 0$ est non triviale, la formule (1.45) implique alors que $f > 0$ partout. \square

Remarque 1.25. *Pour le cas général on ne peut dissocier V du Laplacien et on doit montrer directement que l'opérateur $(-\Delta + V + C)^{-1}$ a un noyau strictement positif. Plus précisément, on démontre que, pour C assez grand, l'équation*

$$(-\Delta + V + C)f = h$$

admet une unique solution $\psi \in H^1(\mathbb{R}^d)$, qui peut s'écrire

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} G(x, y) h(y) dy$$

où $G > 0$ presque partout sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$. Une approche fréquemment utilisée est d'exprimer G par la formule de Feynman-Kac, qui fait intervenir la mesure de Wiener sur l'ensemble de tous les chemins menant de y à x [Sim05, LHB11].

Nous pouvons maintenant écrire la fin de la preuve de l'unicité, en nous basant sur le lemme 1.22 et sur le théorème 1.24. Nous aurons donc fourni tous les détails quand V satisfait les hypothèses supplémentaires mentionnées après le théorème 1.24, ce qui couvre déjà un grand nombre de situations physiques (incluant l'atome d'hydrogène).

Soit donc ψ_0 un minimiseur pour le problème I . Comme $\mathcal{E}(\psi_0) \geq \mathcal{E}(|\psi_0|)$ par le lemme 1.22, $|\psi_0|$ est aussi un minimiseur de l'énergie. Nous pouvons donc supposer dès le départ que $\psi_0 \geq 0$. Comme $\psi_0 \geq 0$ est solution de l'équation

$$(-\Delta + V(x) - I)\psi_0(x) = 0,$$

comme vu plus haut, nous pouvons appliquer le théorème 1.24. Il suit que $\psi_0 > 0$ partout. Ensuite, un calcul basé sur une intégration par parties utilisant l'équation (1.35) montre que

$$\mathcal{E}(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^d} \psi_0(x)^2 \left| \nabla \frac{\varphi}{\psi_0}(x) \right|^2 dx + I \int_{\mathbb{R}^d} |\varphi(x)|^2 dx. \quad (1.47)$$

Cette formule fait sens grâce à la propriété que $\psi_0 > 0$. Elle montre que $\mathcal{E}(\varphi) = \mathcal{E}(\psi_0) = I$ si et seulement si

$$\nabla \frac{\varphi}{\psi_0}(x) = 0$$

presque partout sur \mathbb{R}^d , ce qui signifie que $\varphi = c\psi_0$, comme dans la preuve de l'unicité pour l'atome d'hydrogène. \square

Remarque 1.26. *L'argument utilisé ci-dessus implique une unicité plus forte que celle énoncée. Nous avons en réalité montré que s'il existe $\lambda \in \mathbb{R}$ et $\psi \geq 0$, une fonction normalisée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ telle que*

$$(-\Delta + V(x))\psi(x) = \lambda\psi(x),$$

alors $\lambda = I$ et $\psi = \psi_0$ est l'unique minimiseur. En effet, le théorème 1.24 montre que $\psi > 0$ puis on peut refaire le calcul (1.47) qui implique $\lambda = I = \mathcal{E}(\psi)$. En d'autres termes, nous avons prouvé l'unicité des solutions (ψ, λ) de l'équation tel que ψ est positif.

Dans cette section nous avons étudié une particule quantique dans \mathbb{R}^d , soumise à un potentiel extérieur qui tend vers 0 à l'infini. Nous avons vu qu'il y avait toujours un minimiseur lorsque l'infimum de l'énergie I était négatif (théorème 1.17). Le minimiseur est toujours unique, quand il existe (théorème 1.20). La condition $I < 0$ est physiquement très naturelle. Une particule qui s'en va à l'infini ne voit plus le potentiel V et son énergie minimale est alors nulle, car il ne reste que l'énergie cinétique. Mais ceci n'est pas favorable pour minimiser l'énergie. Ainsi, l'hypothèse $I < 0$ permet d'éviter la perte de compacité à l'infini en la rendant non favorable du point de vue énergétique.

Un système plus simple, et également important physiquement, est celui où la particule est *confinée*, ce qui revient à prendre cette fois V qui tend vers $+\infty$ à l'infini, par exemple $V(x) = |x|^2$. L'existence d'un minimiseur pour ce problème est toujours garantie car s'échapper à l'infini coûte maintenant une énergie infinie et devient donc impossible. Cette situation importante est étudiée plus en détail à l'exercice 1.32.

1.6 Introduction au formalisme mathématique de la mécanique quantique

Nous terminons ce chapitre par une rapide description du formalisme abstrait de la mécanique quantique en suivant von Neumann [vN32], sans entrer dans les détails techniques puisque la formulation rigoureuse des principes ci dessous requiert justement les notions de théorie spectrale que nous allons développer dans la suite du cours. Le lecteur pourra toujours penser au cas de la dimension finie $\mathfrak{H} = \mathbb{C}^d$ pour simplifier.

1.6.1 Système physique, états

Un *système physique* fini⁷ est décrit par un *espace de Hilbert* \mathfrak{H} , que l'on suppose toujours séparable. Les *états* du système sont par définition les vecteurs de la sphère unité $S\mathfrak{H} = \{v \in \mathfrak{H} : \|v\| = 1\}$ de \mathfrak{H} , modulo les phases. L'ensemble des états physique est donc le quotient $S\mathfrak{H}/\sim$ de la sphère unité par la relation d'équivalence définie par $v \sim v'$ si et seulement si $v = e^{i\theta}v'$. Il est souvent plus commode de travailler dans la sphère $S\mathfrak{H}$ plutôt que dans le quotient, à condition de vérifier à tout moment que les quantités calculées sont bien indépendantes des phases.

7. Nous ne parlons pas ici des systèmes infinis, pour lesquels il peut être difficile voire impossible de trouver un espace de Hilbert fixe dans lequel vivent et évoluent les états du système. Il est alors souvent plus commode de décrire les états physiques comme une forme linéaire sur une C^* -algèbre bien choisie [BR02].

Exemple 1.27. Pour l'électron de l'atome d'hydrogène, nous avons $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ lorsqu'on néglige le spin et $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3 \times \{\uparrow, \downarrow\}, \mathbb{C}) = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$ si on en tient compte. Nous verrons de nombreux autres exemples plus loin.

1.6.2 Observables

Les *observables physiques* sont les quantités que l'on peut en principe mesurer expérimentalement : énergie, position, vitesse, etc. Dans le formalisme quantique, elles sont représentées par des *opérateurs auto-adjoints* agissant sur \mathfrak{H} . La plupart des exemples importants sont des *opérateurs non bornés*, ce qui complique grandement la définition mathématique de l'auto-adjonction. Nous en parlerons longuement au chapitre suivant.

Exemple 1.28. Pour l'électron, l'observable "position" est l'opérateur $X : f \mapsto xf$, qui est en fait un vecteur contenant 3 opérateurs distincts $X_j : f \mapsto x_j f$ correspondant aux 3 axes de \mathbb{R}^3 dans le repère choisi. De la même façon, l'observable "quantité de mouvement" est la collection $P = (P_1, P_2, P_3)$ des trois opérateurs $P_j : f \mapsto -i\partial_{x_j} f$. Enfin, nous avons vu que l'observable "énergie" est l'opérateur $H = -\Delta/2 - |x|^{-1}$.

Pour une observable décrite par l'opérateur auto-adjoint A , la valeur moyenne de cette quantité lorsque le système est dans l'état $v \in S\mathfrak{H}$ est par définition $\langle v, Av \rangle$ (v doit satisfaire des conditions appropriées de sorte que ce produit scalaire fasse sens). Ceci n'est que la valeur moyenne. Les quantités que l'on peut obtenir par l'expérience sont en fait aléatoires, données par une mesure de probabilité $\mu_{A,v}$ sur \mathbb{R} (dépendant de A et de l'état v), appelée *mesure spectrale*. Elle est bien sûr telle que la valeur moyenne soit donnée par

$$\langle v, Av \rangle = \int_{\mathbb{R}} a d\mu_{A,v}(a).$$

La probabilité $\mu_{A,v}$ est toujours à support dans le *spectre de A* et sa définition rigoureuse est un peu subtile, nous la verrons au chapitre 4.

Pour simplifier, expliquons la définition de $\mu_{A,v}$ en dimension finie $\mathfrak{H} = \mathbb{C}^d$, auquel cas A est juste une matrice hermitienne $d \times d$. La matrice A peut être diagonalisée dans une base orthonormée v_1, \dots, v_d de \mathbb{C}^d , avec des valeurs propres $\lambda_1, \dots, \lambda_d$ (certains λ_j peuvent coïncider en cas de dégénérescence). La mesure $\mu_{A,v}$ est dans ce cas définie sur $\{\lambda_1, \dots, \lambda_d\} \subset \mathbb{R}$ par les probabilités $p_j = |\langle v, v_j \rangle|^2$, c'est-à-dire

$$\mu_{A,v} = \sum_{j=1}^d |\langle v, v_j \rangle|^2 \delta_{\lambda_j}.$$

Comme les v_j forment une base orthonormée, on a bien sûr

$$\int_{\mathbb{R}} d\mu_{A,v}(a) = \sum_{j=1}^d p_j = \sum_{j=1}^d |\langle v, v_j \rangle|^2 = \|v\|^2 = 1.$$

Nous voyons que les mesures expérimentales ne peuvent donner que les valeurs $\lambda_1, \dots, \lambda_d$, chaque λ_j étant observé avec la probabilité $p_j = |\langle v, v_j \rangle|^2$, qui dépend de l'état v du système. S'il s'avère que v est égal à l'un des v_j , alors on devra nécessairement obtenir λ_j . Mais pour des v très variés on peut obtenir toutes les probabilités possibles sur $\{\lambda_1, \dots, \lambda_d\}$.

Cette définition s'étend aisément au cas de la dimension infinie pour les opérateurs A qui sont diagonalisables dans une base orthonormée (par exemple les opérateurs auto-adjoints compacts rappelés plus loin à la section 5.2.1). Par contre, la définition pour un opérateur auto-adjoint général est plus subtile. Nous la verrons au chapitre 4 à la remarque 4.12.

Un postulat important mais encore abondamment discuté est celui qui exprime l'action d'une mesure expérimentale sur un système quantique (la "réduction du paquet d'onde"). Nous n'en parlons pas ici.

1.6.3 Évolution du système

La dynamique d'un système quantique est décrite par l'équation de Schrödinger

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} v(t) = H v(t) \\ v(0) = v_0. \end{cases}$$

où H est l'observable "énergie". Éventuellement, l'opérateur H peut dépendre du temps, lorsque le système est soumis à des forces extérieures qui varient. Si H est indépendant du temps, on obtient un système Hamiltonien, comme nous l'avons expliqué dans le cas de l'électron dans l'atome d'hydrogène. En dimension finie, la solution de l'équation avec $v(0) = v_0$ est donnée par la formule

$$v(t) = e^{-itH} v_0 \quad (1.48)$$

où e^{-itH} est par définition la matrice unitaire dont les valeurs propres sont égales à $e^{-it\lambda_j}$ dans la base des v_j qui diagonalise H . Nous voyons alors facilement que l'énergie moyenne

$$\langle v(t), H v(t) \rangle = \langle e^{-iHt} v_0, H e^{-iHt} v_0 \rangle = \langle v_0, e^{iHt} H e^{-iHt} v_0 \rangle = \langle v_0, H v_0 \rangle$$

est conservée au cours du temps. De façon similaire, la mesure spectrale $\mu_{H,v}$ est également invariante par la dynamique car

$$|\langle e^{-iHt} v_0, v_j \rangle|^2 = |\langle v_0, e^{iHt} v_j \rangle|^2 = \left| \langle v_0, e^{i\lambda_j t} v_j \rangle \right|^2 = |\langle v_0, v_j \rangle|^2$$

pour tout vecteur propre v_j de H . Par ailleurs, les états stationnaires (modulo phases) sont les vecteurs propres de H . Ces propriétés resteront vraies en dimension infinie pour tout opérateur auto-adjoint H .

1.6.4 Réunion de systèmes quantiques

Lorsqu'on met ensemble deux systèmes physiques représentés chacun par les espaces \mathfrak{H}_1 et \mathfrak{H}_2 et, disons, des Hamiltoniens H_1 et H_2 , la réunion des deux systèmes est toujours décrite par le produit tensoriel $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$. Le Hamiltonien du système total est souvent sous la forme

$$H = H_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_2 + I_{12}$$

où $H_1 \otimes \mathbb{1}$ signifie que l'opérateur n'agit que sur la première partie du produit tensoriel et vaut l'identité sur l'autre partie :

$$(H_1 \otimes \mathbb{1})v_1 \otimes v_2 = (H_1 v_1) \otimes v_2. \quad (1.49)$$

L'opérateur I_{12} qui fait intervenir les deux composantes décrit alors l'interaction entre les deux systèmes.

Ainsi, un système comprenant N particules quantiques devra être décrit par un produit tensoriel de N espaces de Hilbert. Cette propriété engendre une croissance exponentielle du nombre de variables par rapport N , ce qui est l'un des défauts principaux du formalisme quantique. Cette croissance démesurée rend le calcul numérique, même approché, des solutions de l'équation de Schrödinger très difficile dès que N devient trop grand. Nous y reviendrons lorsque nous étudierons les atomes et les molécules au chapitre 6.

Exemple 1.29 (Atome d'hydrogène complet). *Si on décrit le proton de l'atome d'hydrogène comme une particule quantique, au lieu d'une particule classique fixe comme nous l'avons fait au début de ce chapitre, nous devons travailler dans*

$$\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) = L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \mathbb{C}).$$

Ici, le produit tensoriel signifie qu'on considère les combinaisons linéaires de fonctions sous la forme $f(x)g(y)$ avec $x, y \in \mathbb{R}^3$, ce qui engendre toutes les fonctions de deux variables. En fait, si (f_j) est une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$, alors $(f_j \otimes f_k)(x, y) := f_j(x)f_k(y)$ est une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \mathbb{C})$. Le Hamiltonien décrivant l'atome d'hydrogène complètement quantifié (nous avons à nouveau négligé le spin pour simplifier) est alors donné par

$$H = -\frac{\Delta_x}{2m} - \frac{\Delta_y}{2M} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|x-y|}$$

qui est bien sous la forme (1.49). Les termes s'interprètent de gauche à droite comme l'énergie cinétique de l'électron (de masse m), celle du proton (de masse M) et l'interaction Coulombienne entre eux. L'état du système est représenté par des fonctions d'onde $\Psi(x, y) \in L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \mathbb{C})$, où $|\Psi(x, y)|^2$ est la densité de probabilité que l'électron soit en $x \in \mathbb{R}^3$ et que le proton soit

en $y \in \mathbb{R}^3$ et une interprétation similaire pour la transformée de Fourier. L'énergie correspondante est, bien sûr,

$$\mathcal{E}(\Psi) = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_x \Psi(x, y)|^2 dx dy + \frac{1}{2M} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_y \Psi(x, y)|^2 dx dy - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\Psi(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy. \quad (1.50)$$

L'approximation de Born-Oppenheimer (consistant à traiter le proton comme une particule classique) peut être justifiée à la limite $M \rightarrow \infty$.

Exercice 1.30. Montrer que l'atome d'hydrogène où l'électron et le proton sont tous les deux traités par la mécanique quantique est stable. Déterminer l'infimum de son énergie (1.50) dans l'ensemble $\{\Psi \in H^1(\mathbb{R}^6) : \|\Psi\|_{L^2(\mathbb{R}^6)} = 1\}$. On pourra effectuer le changement de variable $u = (mx + My)/(m + M)$ et $v = x - y$.

1.6.5 Quantification*

Le formalisme abstrait présenté jusqu'à présent ne précise pas comment choisir l'espace \mathfrak{H} et les observables importantes pour décrire le système. Nous discutons ici rapidement de cette question

En pratique, on dispose souvent déjà d'une description *classique* du système physique étudié et il s'agit d'en déduire le modèle *quantique* correspondant, un procédé qui s'appelle *quantification*.⁸ En principe, la règle est simple puisqu'il suffit de remplacer p par $-i\hbar\nabla$, ce qui transforme l'énergie classique E du système en un opérateur H .

Toutefois, ce procédé n'est pas clairement défini pour tous les cas envisageables. Imaginons une fonction $a(x, p)$ définie sur l'espace des phases $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ d'une particule évoluant dans \mathbb{R}^d . On aimerait pouvoir associer à chaque telle fonction un opérateur $A = \text{Op}_\hbar(a)$ sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, de sorte que l'application

$$a \mapsto \text{Op}_\hbar(a)$$

satisfasse de bonnes propriétés mathématiques. Par exemple il semble naturel de demander qu'elle soit un morphisme d'algèbre si on se restreint à un ensemble de fonctions a formant une algèbre. Plus précisément on peut demander

- que l'application soit linéaire ;
- que si $a(x, p) = f(x)$, $\text{Op}_\hbar(a)$ soit l'opérateur $\psi(x) \mapsto f(x)\psi(x)$;

⁸ Évidemment, c'est le modèle quantique qui est fondamental. Le modèle classique doit en principe se déduire de ce dernier dans une limite appropriée, et pas l'inverse. Cependant, le modèle classique est le plus souvent connu et a déjà montré sa capacité à fournir des prédictions expérimentales convenables dans certains régimes. Il s'agit donc plutôt de construire un modèle quantifié qui a le comportement approprié à la limite $\hbar \rightarrow 0$.

- que si $a(x, p) = g(p)$, $\text{Op}_\hbar(a)$ soit l'opérateur $\psi \mapsto g(-i\hbar\nabla)\psi$ défini en Fourier par $\mathcal{F}\{g(-i\hbar\nabla)\psi\}(k) = g(\hbar k)\widehat{\psi}(k)$, ce qui signifie que $g(-i\hbar\nabla)\psi = (2\pi)^{d/2}\hbar^{-d}\check{g}(\hbar^{-1}\cdot) * \psi$ où \check{g} est la transformée de Fourier inverse de g ;
- que $\text{Op}_\hbar(F(a)) = F(\text{Op}_\hbar(a))$ où le terme de droite est entendu au sens du calcul fonctionnel (voir la section 4.3) ;
- que si $a \geq 0$ presque partout sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, alors l'opérateur $\text{Op}_\hbar(a)$ soit positif, au sens où $\langle v, \text{Op}_\hbar(a)v \rangle \geq 0$ pour tout v ;
- que l'application conserve la norme :

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} a(x, p) dx dp = \text{Tr}(\text{Op}_\hbar(a))$$

où $\text{Tr}(A) = \sum_j \langle v_j, Av_j \rangle$ est la trace de A ;

- (...)

On peut ajouter de nombreuses autres conditions très naturelles que nous ne discuterons pas ici. Malheureusement, ceci ne permet pas d'identifier un processus de quantification universel car il n'existe pas d'application Op_\hbar qui satisfasse toutes les propriétés voulues. Il existe de nombreuses solutions possibles, chacune avec ses avantages et ses inconvénients. Elles coïncident toutes à la limite $\hbar \rightarrow 0$.

Pour comprendre la difficulté du processus de quantification, considérons l'exemple une fonction sous la forme $a(x, p) = f(x)g(p)$. On peut penser définir sa quantification comme

$$A_1 := f(x)g(-i\hbar\nabla)$$

qui est l'opérateur défini sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ par

$$(A_1\psi)(x) = (2\pi)^{d/2}\hbar^{-d} f(x) \int_{\mathbb{R}^d} \check{g}\left(\frac{x-y}{\hbar}\right) \psi(y) dy,$$

où \check{g} est la transformée de Fourier inverse de g . Celui défini dans l'autre sens

$$A_2 := g(-i\hbar\nabla)f(x)$$

agit comme

$$(A_2\psi)(x) = (2\pi)^{d/2}\hbar^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \check{g}\left(\frac{x-y}{\hbar}\right) f(y)\psi(y) dy.$$

On peut vérifier que A_1 et A_2 sont bien définis et bornés si, par exemple $f, g \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Nous y reviendrons plus tard à la section 5.2.1. Une troisième possibilité, plus symétrique, s'écrit

$$A_3 = \frac{A_1 + A_2}{2},$$

c'est-à-dire

$$(A_3\psi)(x) = (2\pi)^{d/2}\hbar^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \check{g}\left(\frac{x-y}{\hbar}\right) \frac{f(x)+f(y)}{2} \psi(y) dy.$$

L'opérateur A_3 est symétrique (si f et g sont à valeurs réelles), ce qui semble plus naturel étant donné qu'on doit normalement utiliser des opérateurs auto-adjoints. Mais on peut également introduire l'opérateur défini par

$$(A_4\psi)(x) = (2\pi)^{d/2}\hbar^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \check{g}\left(\frac{x-y}{\hbar}\right) f\left(\frac{x+y}{2}\right) \psi(y) dy \quad (1.51)$$

qui s'appelle *quantification de Weyl* et est aussi symétrique. Comme

$$\hbar^{-d}\check{g}(\hbar^{-1}\cdot) \rightharpoonup \delta_0 \int_{\mathbb{R}^d} \check{g}(x) dx = \frac{g(0)}{(2\pi)^{d/2}} \delta_0$$

au sens des distributions, on voit que les quatre solutions convergent vers la même limite quand $\hbar \rightarrow 0$.

En pratique, on rencontre assez peu de tels problèmes de quantification, car les Hamiltoniens classiques sont très souvent des sommes de fonctions de x et de fonctions de p , comme nous l'avons vu pour l'atome d'hydrogène. Il existe cependant quelques opérateurs importants qui mélangent x et p . Avoir conscience des limitations mathématiques du procédé de quantification est par ailleurs nécessaire à une bonne compréhension du formalisme quantique.

Exercices complémentaires

Exercice 1.31 (Inégalité de Hardy).

1. On se place dans \mathbb{R}^d avec $d \geq 3$. Pour $u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $\alpha \in \mathbb{R}$, développer

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left| \nabla u(x) + \alpha \frac{x}{|x|^2} u(x) \right|^2 dx$$

et en déduire l'inégalité de Hardy

$$\int_{\mathbb{R}^d} \frac{|u(x)|^2}{|x|^2} dx \leq \left(\frac{2}{d-2} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx. \quad (1.52)$$

2. Montrer que $x \mapsto u(x)/|x|$ appartient à $L^2(\mathbb{R}^d)$ pour tout $u \in H^1(\mathbb{R}^d)$ et que (1.52) reste valable dans $H^1(\mathbb{R}^d)$.

3. En utilisant la fonction radiale

$$u(x) = |x|^{-\alpha} \mathbf{1}(|x| \leq 1) + (2 - |x|) \mathbf{1}(1 \leq |x| \leq 2),$$

montrer que la constante $2/(d-2)$ est la meilleure possible dans (1.52).

4. Donner une preuve de la stabilité de l'atome d'hydrogène basée sur l'inégalité (1.52).

Exercice 1.32 (Une particule confinée dans \mathbb{R}^d). Soit $V = V_+ - V_-$ où $V_\pm \geq 0$ sont des potentiels à valeurs réelles tels que $V_- \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ où p satisfait (1.31) et $V_- \rightarrow 0$ à l'infini, et $V_+ \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$ avec $V_+(x) \rightarrow +\infty$ quand $|x| \rightarrow +\infty$. On considère l'énergie

$$\mathcal{E}(u) = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|u(x)|^2 dx.$$

1. Montrer que \mathcal{E} est bien définie et continue sur l'espace

$$\mathcal{V} := \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^d) : V_+^{1/2}u \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

muni de la norme

$$\|u\|_{\mathcal{V}}^2 = \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 + \int_{\mathbb{R}^d} V_+(x)|u(x)|^2 dx.$$

2. Montrer que

$$I = \inf_{\substack{u \in \mathcal{V} \\ \int_{\mathbb{R}^d} |u|^2 = 1}} \mathcal{E}(u) > -\infty$$

3. Montrer que \mathcal{V} s'injecte de façon compacte dans $L^2(\mathbb{R}^d)$.

4. En déduire que I est atteint et écrire l'équation vérifiée par tout minimiseur.

Remarque : Il est possible de montrer l'unicité avec des arguments similaires à cette section, car le principe du maximum vu au théorème 1.24 est en fait une propriété locale, voir [LL01].

Chapitre 2

Auto-adjonction

Rappelons qu'une matrice carrée A de taille d à coefficients complexes est dite *auto-adjointe* ou *hermitienne* lorsque $A^* = A$ où A^* est par définition la matrice obtenue en appliquant la transposée et en prenant la conjugaison complexe de tous les coefficients. La propriété $A^* = A$ est équivalente à $\langle v, Aw \rangle_{\mathbb{C}^d} = \langle Av, w \rangle_{\mathbb{C}^d}$ où $\langle v, w \rangle_{\mathbb{C}^d} = v^*w$ est le produit scalaire de \mathbb{C}^d . Les matrices auto-adjointes sont toutes diagonalisables dans une base orthonormée et leurs valeurs propres sont réelles.

La généralisation en dimension infinie est bien plus laborieuse. L'objectif de ce chapitre est de développer la théorie correspondante. Des références classiques pour la théorie spectrale des opérateurs auto-adjoints sont [RS75, Wei87, Dav95, Dav07, Hel13].

2.1 Opérateurs, graphe, extension

Soit \mathfrak{H} un espace de Hilbert séparable quelconque. Il est souvent nécessaire de considérer des applications linéaires A qui ne sont définies que sur un sous-espace $D(A)$ de \mathfrak{H} , appelé *domaine de A* .

Définition 2.1 (Opérateurs en dimension infinie). *Un opérateur sur \mathfrak{H} est la donnée d'un sous-espace dense $D(A) \subset \mathfrak{H}$ et d'une application linéaire $A : D(A) \rightarrow \mathfrak{H}$.*

On peut travailler sans l'hypothèse que $D(A)$ est dense, mais l'ajouter simplifie grandement le cadre de l'étude. La densité jouera un rôle important au moment de définir l'adjoint de A à la section 2.4. En dimension infinie, il est absolument nécessaire de toujours spécifier le domaine $D(A)$ sur lequel on travaille. Comme nous allons le voir sur des exemples, la résolution de l'équation aux valeurs propres $Av = \lambda v$ dépend fortement du domaine considéré.

L'exemple le plus simple d'un opérateur A est celui d'une application linéaire définie sur tout l'espace $D(A) = \mathfrak{H}$, mais nous verrons de nombreux exemples d'opérateurs qui ne peuvent pas être définis sur tout \mathfrak{H} et dont le domaine est nécessairement un sous-espace strict de \mathfrak{H} . Nous pensons particulièrement à la dérivation $f \mapsto f'$ qui est bien linéaire mais qui

n'est pas définie sur $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1[)$. On peut la définir sur $L^2(]0, 1[)$ mais son image est alors une distribution qui n'appartient pas nécessairement à $L^2(]0, 1[)$. L'opérateur de dérivation est par contre bien défini sur $C_c^\infty(]0, 1[)$, par exemple, ou sur l'espace de Sobolev $H^1(]0, 1[) \subset L^2(]0, 1[)$.

Au lieu de se donner A et son domaine $D(A)$, il est parfois commode de travailler avec le *graphe de A* , qui contient à la fois l'opérateur et son domaine de définition.

Définition 2.2 (Graphe d'un opérateur). *On appelle graphe d'un opérateur $(A, D(A))$ le sous-espace vectoriel de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$*

$$G(A) = \{(v, Av) \in D(A) \times \mathfrak{H}\}. \quad (2.1)$$

Réciproquement, il est légitime de se demander à quelle condition un sous-espace de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ est le graphe d'un opérateur, ce qui est l'objet du lemme suivant.

Lemme 2.3 (Graphe). *Un ensemble $G \subset \mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ est le graphe d'un opérateur $(A, D(A))$ si et seulement si*

- (i) G est un sous-espace vectoriel de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$;
- (ii) $(0, y) \in G$ implique $y = 0$;
- (iii) la projection $D = \{x \in \mathfrak{H} : \exists y \in \mathfrak{H}, (x, y) \in G\}$ est dense dans \mathfrak{H} .

Démonstration. Afin de pouvoir définir une application A , il est nécessaire que chaque point ait une unique image, donc que si (x, y) et (x, z) appartiennent tous les deux à G , on puisse en déduire que $y = z$. Comme G est un sous-espace vectoriel de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ (ce qui implique que l'application correspondante est linéaire), ceci est équivalent à (ii). La condition (iii) est la densité du domaine de A . \square

Nous pouvons comparer différentes réalisations d'un même opérateur sur des domaines inclus les uns dans les autres en utilisant la notion d'extension.

Définition 2.4 (Extension d'un opérateur). *Soient A et B deux opérateurs définis respectivement sur $D(A)$ et $D(B)$. On dit que B est une extension de A et on note $A \subset B$ si $D(A) \subset D(B)$ et si B coïncide avec A sur $D(A)$, c'est-à-dire si $Bx = Ax$ pour tout $x \in D(A)$. Une définition équivalente consiste à demander que $G(A) \subset G(B)$.*

Exemple 2.5. *On peut définir l'opérateur de dérivation $f \mapsto f'$ dans $D(A_1) = C_c^\infty(]0, 1[)$ ou dans $D(A_2) = H^1(]0, 1[)$, et on a alors $A_1 \subset A_2$.*

2.2 Spectre

On appelle spectre d'une matrice carrée l'ensemble des nombres complexes λ tels que $\det(A - \lambda) = 0$, c'est-à-dire tels que $A - \lambda$ ne soit pas inversible. L'inversibilité est ici équivalente à la non injectivité ou à la non surjectivité de $A - \lambda$. Par ailleurs, l'inverse $(A - \lambda)^{-1}$ est toujours une application continue car linéaire. En dimension infinie la situation est plus complexe car une application linéaire peut être injective sans être surjective, et réciproquement. De plus, l'inverse peut exister sans être borné. La définition du spectre est la suivante.

Définition 2.6 (Spectre). *Soit A un opérateur défini sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$. On appelle ensemble résolvant de A le sous-ensemble de \mathbb{C}*

$$\rho(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} \text{ tels que } A - \lambda : D(A) \rightarrow \mathfrak{H} \\ \text{est inversible, d'inverse } (A - \lambda)^{-1} : \mathfrak{H} \rightarrow D(A) \subset \mathfrak{H} \text{ borné}\}.$$

Le spectre de A est par définition l'ensemble $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$.

L'hypothèse que $(A - \lambda)^{-1}$ est borné signifie qu'il existe une constante C telle que $\|(A - \lambda)^{-1}v\| \leq C\|v\|$ pour tout $v \in \mathfrak{H}$ ou, dit autrement, que $(A - \lambda)^{-1}$ définit une application continue sur \mathfrak{H} (mais qui prend ses valeurs dans $D(A)$). Lorsque $\lambda \in \rho(A)$, l'opérateur $(A - \lambda)^{-1}$ est appelé *résolvante*. Remarquons que si $D(A) = \mathfrak{H}$ et A est borné, alors l'inversibilité de $(A - \lambda)$ implique automatiquement que $(A - \lambda)^{-1}$ est borné, par le théorème de l'application ouverte. Cependant, pour un opérateur non borné il est important d'ajouter l'hypothèse que la résolvante $(A - \lambda)^{-1}$ est bornée, dans la définition de $\rho(A)$.

Nous voyons qu'un nombre complexe λ peut appartenir au spectre de A pour plusieurs raisons différentes. Par exemple $A - \lambda$ pourrait ne pas être injectif, et il existe alors un $v \neq 0$ tel que $Av = \lambda v$. Dans ce cas, λ est appelée une *valeur propre de A* et v est un *vecteur propre associé*. La *multiplicité* (géométrique) de λ est par définition la dimension de $\ker(A - \lambda)$ et elle peut être finie ou infinie. Mais il est également possible que $A - \lambda$ soit injectif sans être surjectif, ou même qu'il soit inversible mais que son inverse ne soit pas borné sur \mathfrak{H} .

Exemple 2.7 (Décalage). *Sur $\mathfrak{H} = \ell^2(\mathbb{N})$ on introduit le décalage à droite S défini par $S(\mathbf{x}) = (0, x_1, x_2, \dots)$ pour $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots) \in \ell^2(\mathbb{N})$. Alors S est injectif mais pas surjectif. Donc $0 \in \sigma(S)$ mais 0 n'est pas une valeur propre.*

Avant d'aller plus loin nous commençons par prouver que le spectre d'un opérateur est toujours un ensemble fermé.

Lemme 2.8 ($\sigma(A)$ est fermé). *Soit A un opérateur défini sur son domaine $D(A)$ et $z \in \rho(A)$. Alors la boule ouverte de centre z et de rayon*

$$\frac{1}{\|(A - z)^{-1}\|}$$

est incluse dans $\rho(A)$. En particulier, $\sigma(A)$ est fermé.

Démonstration. On peut écrire

$$A - z - \eta = \left(1 - \eta(A - z)^{-1}\right)(A - z)$$

où l'opérateur $A - z$ à droite est une bijection de $D(A)$ dans \mathfrak{H} puisque $z \in \rho(A)$ par hypothèse, et l'opérateur $1 - \eta(A - z)^{-1}$ est borné sur \mathfrak{H} . Or on sait que pour tout opérateur borné B de norme $\|B\| < 1$, l'opérateur $1 - B$ est inversible avec

$$(1 - B)^{-1} = \sum_{n \geq 0} B^n.$$

Ainsi, l'opérateur $1 - \eta(A - z)^{-1}$ est inversible pour $\eta\|(A - z)^{-1}\| < 1$. Comme composition d'opérateurs inversibles, on conclut alors que $A - z - \eta$ est inversible de $D(A)$ dans \mathfrak{H} d'inverse borné, égal à

$$(A - z - \eta)^{-1} = (A - z)^{-1} \sum_{n \geq 0} \eta^n (A - z)^{-n},$$

ceci pour tout $\eta\|(A - z)^{-1}\| < 1$. □

2.3 Fermeture

Nous discutons ici de l'importance du concept de fermeture d'un opérateur.

Définition 2.9 (Opérateur fermé). *On dit qu'un opérateur A de domaine $D(A)$ est fermé lorsque son graphe $G(A)$ est fermé dans $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ ou, en d'autres termes, si pour toute suite $(x_n) \subset D(A)$ telle que $x_n \rightarrow x$ et $Ax_n \rightarrow y$, on a alors $x \in D(A)$ et $Ax = y$.*

Par le théorème du graphe fermé, A est fermé si et seulement si $A : D(A) \rightarrow \mathfrak{H}$ est continu, lorsque $D(A)$ est muni de la norme du graphe

$$\|x\|_{D(A)} = \|x\|_{\mathfrak{H}} + \|Ax\|_{\mathfrak{H}}.$$

La proposition suivante montre l'importance du concept de fermeture.

Proposition 2.10 (Spectre d'un opérateur non fermé). *Si A , défini sur $D(A)$, n'est pas fermé, alors on a $\sigma(A) = \mathbb{C}$.*

Démonstration. Par contraposée, nous montrons que si $\sigma(A) \neq \mathbb{C}$, alors A est obligatoirement fermé. Supposons en effet que $z \notin \sigma(A)$ et considérons une suite $(x_n) \subset D(A)$ telle que $x_n \rightarrow x$ et $Ax_n \rightarrow y$. Puisque $(A - z)$ est inversible d'inverse borné, on a

$$(A - z)^{-1}Ax_n = x_n + z(A - z)^{-1}x_n.$$

En passant à la limite on obtient, grâce à la continuité de $(A - z)^{-1}$,

$$(A - z)^{-1}y = x + z(A - z)^{-1}x.$$

Ainsi $x = (A - z)^{-1}(y - zx) \in D(A)$ car $(A - z)^{-1}$ est à image dans $D(A)$. En composant à gauche par $(A - z)$, il est alors facile de voir que $Ax = y$. \square

De ce résultat nous concluons que définir un opérateur A sur un domaine trop petit est vraiment une mauvaise idée, car l'opérateur pourrait ne pas être fermé et dans ce cas le spectre sera égal à tout le plan complexe, ce qui contredit notre intuition physique que, par exemple, le spectre d'un opérateur auto-adjoint doit être réel.

Exemple 2.11 (Impulsion sur \mathbb{R}). Dans $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R})$, considérons l'opérateur impulsion P^{\min} défini par $P^{\min}f = -if'$, par exemple sur $D(P^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R})$. Alors P^{\min} n'est pas fermé, donc

$$\sigma(P^{\min}) = \mathbb{C}.$$

Pour voir que P^{\min} n'est pas fermé il suffit de prendre une fonction $f \in H^1(\mathbb{R}) \setminus C_c^\infty(\mathbb{R})$, par exemple $f(x) = e^{-|x|^2}$ et de rappeler qu'il existe une suite $f_n \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ telle que $f_n \rightarrow f$ et $f'_n \rightarrow f'$ dans $L^2(\mathbb{R})$. Le couple $(f, -if')$ est alors dans l'adhérence du graphe de P^{\min} , sans être dans le graphe.

Si on a commencé par définir un opérateur A sur un domaine très petit, de sorte que tout soit aisément défini, il semble naturel de chercher à le fermer en fermant son graphe. Malheureusement, la fermeture du graphe d'un opérateur non fermé n'est pas toujours un graphe. En effet, si les propriétés (i) et (iii) du lemme 2.3 passent facilement à la fermeture, il n'en est pas de même de la propriété (ii), qui peut être perdue. Ceci amène la définition suivante.

Définition 2.12 (Fermeture). Soit A un opérateur défini sur son domaine $D(A)$. On dit que A est fermable s'il admet au moins une extension fermée. Dans ce cas, $\overline{G(A)}$ est le graphe d'un opérateur noté \overline{A} , de domaine $D(\overline{A})$ et appelé la fermeture de A . C'est la plus petite extension fermée de $(A, D(A))$.

La définition contient l'assertion qu'il suffit d'avoir une extension fermée pour en déduire que la fermeture du graphe $\overline{G(A)}$ est le graphe d'un opérateur. En effet, si B est une extension fermée de A , alors $G(A) \subset \overline{G(A)} \subset G(B)$ car $\overline{G(A)}$ est par définition le plus petit fermé contenant $G(A)$. Mais alors la propriété (ii) du lemme 2.3 est vérifiée, puisque si $(0, y) \in \overline{G(A)}$ alors $(0, y) \in G(B)$, donc $y = 0$.

Nous donnons maintenant des exemples qui illustrent l'importance des espaces de Sobolev, qui apparaissent comme les domaines des fermetures des opérateurs différentiels ordinaires. Nous exhiberons un opérateur non fermable plus tard à l'exercice 2.18.

Théorème 2.13 (Fermeture de ∂_{x_j} et Δ dans \mathbb{R}^d). Dans $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, soit P_j^{\min} l'opérateur défini par $P_j^{\min} f = -i\partial_{x_j} f$, sur le domaine $D(P_j^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$. Alors P_j^{\min} est fermable et sa fermeture est l'opérateur $\overline{P_j^{\min}} =: P_j$ donné par $P_j f = -i\partial_{x_j} f$ sur le domaine

$$\begin{aligned} D(P_j) &= \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^d) : \partial_{x_j} f \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\} \\ &= \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^d) : k_j \widehat{f}(k) \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\} \end{aligned}$$

où $\partial_{x_j} f$ est ici entendu au sens des distributions.

De façon similaire, soit A^{\min} l'opérateur défini par $A^{\min} f = -\Delta f$, sur le domaine $D(A^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$. Alors A^{\min} est fermable et sa fermeture est l'opérateur $\overline{A^{\min}} =: A$ donné par $Af = -\Delta f$ sur le domaine $D(A) = H^2(\mathbb{R}^d)$.

Si $d = 1$, on a simplement $D(P) = H^1(\mathbb{R})$. Si $d \geq 2$, alors $H^1(\mathbb{R}^d) = \bigcap_{j=1}^d D(P_j)$. Ce théorème fait donc apparaître de façon très naturelle les espaces de Sobolev, sur lesquels il est incontournable de définir les opérateurs différentiels usuels, lorsqu'on désire qu'ils soient fermés.

Démonstration. Il suffit de montrer que la fermeture de $G(P_j^{\min})$ est exactement $\{(f, -i\partial_{x_j} f)\}_{f \in D(P_j)}$. L'inclusion \subset est évidente. Si $(f, -i\partial_{x_j} f)$ est donné dans $L^2(\mathbb{R}^d) \times L^2(\mathbb{R}^d)$, on sait qu'on peut trouver une suite $f_n \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ telle que $f_n \rightarrow f$ et $\partial_{x_j} f_n \rightarrow \partial_{x_j} f$ fortement dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Ainsi, P_j est bien la fermeture de P_j^{\min} . La preuve est similaire pour A , en utilisant en plus le fait que

$$H^2(\mathbb{R}^d) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^d) : \Delta f \in L^2(\mathbb{R}^d)\}$$

(régularité elliptique rappelée à l'Appendice A). □

Les exemples suivants fournissent des résultats similaires sur un intervalle ou une demi-droite, en se basant sur la densité des fonctions régulières dans les espaces de Sobolev et sur la continuité de l'évaluation en un point $f \mapsto f(x_0)$ en dimension $d = 1$. La preuve est très similaire au cas de tout \mathbb{R}^d .

Exemple 2.14 (Impulsion sur un intervalle borné). Dans $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1[)$, la fermeture $P_0 = \overline{P^{\min}}$ de l'opérateur $P^{\min} = -i(d/dx)$, considéré au départ sur $D(P^{\min}) = C_c^\infty(]0, 1[)$, est donnée par $P_0 = -i(d/dx)$ sur le domaine

$$D(P_0) = H_0^1(]0, 1[) = \{f \in L^2(]0, 1[) : f' \in L^2(]0, 1[), f(0) = f(1) = 0\}.$$

On rappelle que les fonctions de $H^1(]0, 1[)$ sont toutes dans $C^0([0, 1])$ et admettent donc des valeurs au bord $f(0)$ et $f(1)$ bien définies (lemme A.2 à la section A.2 de l'appendice A).

De la même façon, la fermeture P^{\max} de l'opérateur $-i(d/dx)$ défini sur $C^\infty([0, 1])$ est donnée par $P^{\max} = -i(d/dx)$ sur le domaine

$$D(P^{\max}) = H^1(]0, 1]) = \{f \in L^2(]0, 1]) : f' \in L^2(]0, 1])\}.$$

Les notations P^{\min} et P^{\max} sont communément employées et renvoient au fait que P^{\min} est défini sur le domaine le plus petit, alors que P^{\max} l'est sur le plus grand qu'on puisse imaginer. Nous verrons plus tard que les extensions auto-adjointes de P^{\min} sont toutes entre P^{\min} et P^{\max} .

Exemple 2.15 (Impulsion sur la demi-droite). Dans $\mathfrak{H} = L^2(]0, +\infty[)$, la fermeture P_0 de l'opérateur $P^{\min} = -i(d/dx)$, considéré au départ sur $D(P^{\min}) = C_c^\infty(]0, \infty[)$, est donnée par $P_0 = -i(d/dx)$ sur le domaine

$$D(P_0) = H_0^1(]0, \infty[) = \{f \in L^2(]0, \infty[) : f' \in L^2(]0, \infty[), f(0) = 0\}.$$

La fermeture P^{\max} de l'opérateur $-i(d/dx)$ défini au départ sur $C_c^\infty(]0, \infty[)$ (les fonctions à support compact mais qui ne s'annulent pas forcément en 0) est donnée par $P^{\max} = -i(d/dx)$ sur le domaine

$$D(P^{\max}) = H^1(]0, +\infty[) = \{f \in L^2(]0, +\infty[) : f' \in L^2(]0, +\infty[)\}.$$

Exemple 2.16 (Laplacien sur un intervalle borné). Dans $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1])$, la fermeture A_0 de l'opérateur $A^{\min} = -d^2/dx^2$, considéré au départ sur $D(A^{\min}) = C_c^\infty(]0, 1])$, est l'opérateur $A_0 = -d^2/dx^2$, défini sur le domaine

$$\begin{aligned} D(A_0) &= D(\overline{A^{\min}}) = H_0^2(]0, 1]) \\ &= \{f \in H^2(]0, +\infty[) : f(0) = f(1) = f'(0) = f'(1) = 0\}. \end{aligned}$$

La fermeture A^{\max} du même opérateur défini au départ sur $C^\infty([0, 1])$ est définie sur le domaine

$$D(A^{\max}) = H^2(]0, 1]).$$

On notera que, dans nos conventions, les opérateurs minimaux (P^{\min} , A^{\min} etc) ne sont jamais fermés alors que les opérateurs maximaux (P^{\max} , A^{\max} , etc) le sont toujours.

Exercice 2.17. Montrer que la fermeture de l'opérateur $A = \Delta^k$ défini au départ sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ est définie sur $H^{2k}(\mathbb{R}^d)$.

Exercice 2.18 (Un opérateur non fermable). Dans $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1])$, on appelle $\delta_{1/2}$ l'opérateur défini par $(\delta_{1/2}f)(x) = f(1/2)$, par exemple sur le domaine $D(\delta_{1/2}) = C^0([0, 1])$. Montrer qu'il existe une suite de fonctions $f_n \in C^0([0, 1])$ telles que $f_n(1/2) = 1$ pour tout $n \geq 1$ et $f_n \rightarrow 0$ fortement dans $L^2(]0, 1])$. En déduire que la fermeture du graphe de l'opérateur $\delta_{1/2}$ ne vérifie pas la condition (ii) du lemme 2.3, donc que $\delta_{1/2}$ n'est pas fermable. Plus précisément, montrer que

$$\overline{G(\delta_{1/2})} = \{(f, \lambda), f \in L^2(]0, 1]), \lambda \in \mathbb{C}\} = L^2(]0, 1]) \times \mathbb{C}.$$

2.4 Adjoint

Nous pouvons maintenant définir l'adjoint d'un opérateur. Comme en dimension finie nous désirons avoir

$$\langle v, Au \rangle = \langle A^*v, u \rangle \quad (2.2)$$

pour tous $u \in D(A)$ et tout $v \in D(A^*)$. L'idée est de définir A^* sur le domaine $D(A^*)$ le plus grand possible de sorte que cette égalité ait lieu. Cette relation peut encore s'écrire

$$\langle (v, A^*v), (Au, -u) \rangle_{\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}} = 0 \quad (2.3)$$

où le produit scalaire de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ est bien sûr défini par

$$\langle (u_1, u_2), (v_1, v_2) \rangle_{\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}} := \langle u_1, v_1 \rangle + \langle u_2, v_2 \rangle.$$

La relation (2.3) suggère de définir le graphe de l'opérateur A^* comme l'orthogonal du graphe tourné de A :

$$\boxed{G(A^*) = \{(Au, -u), u \in D(A)\}^\perp} \quad (2.4)$$

où l'orthogonal est pris dans $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$. Remarquons que $G(A^*)$ est alors toujours fermé, puisque c'est l'orthogonal d'un sous-espace.

Avant toute chose, nous devons vérifier que l'ensemble $G(A^*)$ introduit en (2.4) est bien le graphe d'un opérateur A^* sur son domaine $D(A^*)$. Il faut donc vérifier les conditions du lemme 2.3. La première remarque est que $G(A^*)$ satisfait bien les propriétés (i) et (ii) du lemme 2.3. Pour (i) c'est évident, puisque l'orthogonal d'un ensemble est toujours un espace vectoriel. Pour (ii), l'argument repose sur la densité de $D(A)$. En effet, on a $(0, w) \in G(A^*)$ si et seulement si $\langle w, u \rangle = 0$ pour tout $u \in D(A)$, d'après la définition. Ainsi

$$D(A)^\perp = \{w \in \mathfrak{H} : (0, w) \in G(A^*)\} \quad (2.5)$$

et notre hypothèse que $D(A)$ est dense, c'est-à-dire $D(A)^\perp = \{0\}$, garantit que l'application linéaire A^* est bien définie. C'est l'une des raisons principales pour lesquelles nous travaillons toujours avec des opérateurs à domaine dense.

Par contre, le domaine $D(A^*)$ n'est lui pas forcément dense dans \mathfrak{H} . On pourrait d'abord penser s'affranchir de cette propriété, mais elle est nécessaire si on désire par exemple pouvoir définir $(A^*)^*$, par l'argument précédent. On peut écrire que $v \in D(A^*)^\perp$ si et seulement si

$$(v, 0) \in G(A^*)^\perp = \left(\{(Au, -u), u \in D(A)\}^\perp \right)^\perp = \overline{\{(Au, -u), u \in D(A)\}}$$

ou, de façon équivalente,

$$(0, v) \in \overline{G(A)}.$$

En d'autres termes, nous avons trouvé que

$$D(A^*)^\perp = \left\{ v \in \mathfrak{H} : (0, v) \in \overline{G(A)} \right\}. \quad (2.6)$$

Ainsi, $D(A^*)$ est dense si et seulement si $\overline{G(A)}$ satisfait la propriété (ii) du lemme 2.3, c'est-à-dire A est fermable.

La conclusion de cette discussion est que

- l'hypothèse que $D(A)$ est dense sert à pouvoir définir l'application A^* mais $D(A^*)$ n'est pas nécessairement dense ;
- $D(A^*)$ est dense si et seulement si A est fermable.

À cause de ces observations, nous ne travaillerons qu'avec des opérateurs fermables à domaine dense. L'adjoint A^* est alors bien défini. Ceci permet alors de considérer $(A^*)^*$, qui se trouve être égal à \overline{A} .

Lemme 2.19 (Double adjoint). *Soit A un opérateur fermable défini sur son domaine $D(A)$. Alors on a*

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

de sorte que

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

Démonstration. La première égalité suit du fait que le bi-orthogonal coïncide avec la fermeture. Le graphe est par ailleurs tourné deux fois dans la définition de $(A^*)^*$, ce qui fait bien apparaître le graphe de \overline{A} . Ensuite, il reste à remarquer que $A^* = \overline{A}^*$, puisque $V^\perp = \overline{V}^\perp$ pour tout sous-espace V . \square

Exercice 2.20. *Si $A \subset B$, montrer que $B^* \subset A^*$.*

Nous déterminons maintenant l'adjoint de quelques uns des opérateurs différentiels introduits précédemment.

Exemple 2.21 (Adjoint de P^{\min} sur un intervalle). *Dans $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1[)$, considérons à nouveau l'opérateur*

$$P^{\min} = -i \frac{d}{dx}, \quad D(P^{\min}) = C_c^\infty(]0, 1[).$$

Nous avons vu à l'exemple 2.14 que sa fermeture était l'opérateur P_0 défini sur $H_0^1(]0, 1[)$. Le graphe de l'adjoint $(P^{\min})^$ est par définition l'ensemble des couples $(f, g) \in L^2(]0, 1[)$ tels que*

$$-i \int_0^1 \overline{f(x)} u'(x) dx = \int_0^1 \overline{g(x)} u(x) dx$$

pour tout $u \in C_c^\infty(]0, 1[)$. Ceci signifie précisément que $-if' = g$ au sens des distributions, donc $f \in H^1(]0, 1[)$ et $(P^{\min})^* f = -if'$. Ainsi, $(P^{\min})^* \subset P^{\max}$, l'opérateur introduit à l'exemple 2.14 et défini sur tout $D(P^{\max}) = H^1(]0, 1[)$. Réciproquement, si $f \in D(P^{\max}) = H^1(]0, 1[)$, on peut intégrer par parties et obtenir

$$\langle P^{\max} f, u \rangle = i \int_0^1 \overline{f'(t)} u(t) dt = -i \int_0^1 \overline{f(t)} u'(t) dt = \langle f, P^{\min} u \rangle$$

puisque les termes de bord s'annulent quand $u \in C_c^\infty(]0, 1[)$. Ceci montre que la relation (2.2) est satisfaite sur le domaine de P^{\max} , donc que $P^{\max} \subset (P^{\min})^*$. Ainsi, nous avons prouvé que $(P^{\min})^* = P^{\max}$.

Par le lemme 2.19 nous savons alors que $(P^{\max})^* = \overline{P^{\min}} = P_0$. Nous pouvons le vérifier comme suit. Par définition, le graphe de l'adjoint de P^{\max} est l'ensemble des couples (f, g) tels que

$$-i \int_0^1 \overline{f(x)} u'(x) dx = \int_0^1 \overline{g(x)} u(x) dx,$$

mais maintenant pour tout $u \in H^1(]0, 1[) = D(P^{\max})$, au lieu de seulement $C_c^\infty(]0, 1[)$ comme avant. En prenant $u \in C_c^\infty(]0, 1[)$ on trouve comme avant que $-if' = g$ avec $f \in H^1(]0, 1[)$. Mais on peut aussi considérer des fonctions $u \in H^1(]0, 1[)$ qui ne s'annulent pas forcément au bord et faire une intégration par parties (on rappelle que les fonctions de $H^1(]0, 1[)$ sont dans $C^0([0, 1])$). On trouve

$$-i \int_0^1 \overline{f(x)} u'(x) dx = i \int_0^1 \overline{f'(x)} u(x) dx - i(\overline{f(1)}u(1) - \overline{f(0)}u(0)).$$

La condition est donc que $\overline{f(1)}u(1) - \overline{f(0)}u(0) = 0$ pour tout $f \in D((P^{\max})^*)$ et tout $u \in H^1(]0, 1[)$. Ceci est équivalent à la condition $f(1) = f(0) = 0$ et nous avons bien retrouvé la fermeture de P^{\min} . En conclusion, nous voyons que tous ces opérateurs sont des réalisations différentes de l'application $f \mapsto -if'$ sur $H^1(]0, 1[)$ et que seules les conditions au bord changent. Il pourra être utile de retenir les conclusions de cet exemple :

$$(P^{\min})^* = P^{\max}, \quad ((P^{\min})^*)^* = (P^{\max})^* = P_0 = \overline{P^{\min}}. \quad (2.7)$$

Exercice 2.22 (Adjoint de $(-\Delta)^{\min}$). Généraliser l'exemple précédent au cas du Laplacien $A^{\min} = -d^2/dx^2$ vu à l'exemple 2.16. Montrer que l'adjoint de $A_0 = -d^2/dx^2$ défini sur $D(A_0) = H_0^2(]0, 1[)$ est l'opérateur $A^{\max} = -d^2/dx^2$ défini sur tout $H^2(]0, 1[)$.

2.5 Symétrie

Pour définir les opérateurs auto-adjoints, il est important de distinguer la propriété de symétrie (déjà rencontrée pour les matrices) et les problèmes

liés au domaine $D(A)$, qui sont eux typiques de la dimension infinie. Nous discutons d'abord de la propriété de symétrie.

Définition 2.23 (Symétrie). *On dit qu'un opérateur A défini sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$ est symétrique lorsque $\langle v, Aw \rangle = \langle Av, w \rangle$ pour tous $v, w \in D(A)$. De façon équivalente $A \subset A^*$, c'est-à-dire $G(A) \subset G(A^*)$.*

Comme A^* est toujours fermé, on en déduit qu'un opérateur symétrique est toujours fermable, avec $\overline{A} = (A^*)^*$. Un opérateur symétrique a donc deux extensions fermées notables, qui sont \overline{A} (la plus petite extension fermée) et A^* . Si B est une extension symétrique de A , alors on a

$$A \subset B \subset B^* \subset A^*.$$

Nous voyons donc que toutes les extensions symétriques de A sont situées entre A et A^* . Si elle sont de plus fermées, elles doivent être entre \overline{A} et A^* .

L'exemple suivant montre que l'adjoint d'un opérateur symétrique n'est pas toujours symétrique, alors que \overline{A} l'est toujours.

Exemple 2.24. *Dans $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1[)$, l'opérateur $P^{\min} = -i(d/dx)$ défini sur son domaine $D(P^{\min}) = C_c^\infty(]0, 1[)$ est bien symétrique car les termes de bord s'en vont lorsqu'on fait une intégration par parties. Sa fermeture $P_0 = \overline{P^{\min}}$ est également symétrique. Par contre leur adjoint $(P^{\min})^* = (P_0)^* = P^{\max}$ qui est défini sur tout $H^1(]0, 1[)$ (exercice 2.24) n'est pas symétrique.*

Exemple 2.25. *L'opérateur $A_0 f = -f''$ est symétrique et fermé sur son domaine $D(A_0) = H_0^2(]0, 1[)$ car les termes de bord s'en vont quand on fait une intégration par parties. Son adjoint A^{\max} défini sur tout $D(A^{\max}) = H^2(]0, 1[)$ (exercice 2.22) n'est pas symétrique.*

Exercice 2.26. *Montrer que si $(A, D(A))$ est symétrique, alors sa fermeture l'est aussi.*

Avant de définir la notion d'auto-adjonction, nous faisons une petite digression spectrale et discutons de la forme du spectre des opérateurs symétriques. En dimension infinie, un opérateur symétrique n'a pas toujours un spectre réel, mais nous allons voir qu'il existe des contraintes importantes sur le spectre des opérateurs symétriques, qui impliquent que seul l'un des quatre cas suivants peut arriver.

Théorème 2.27 (Spectre des opérateurs symétriques). *Soit $(A, D(A))$ un opérateur symétrique et $(\overline{A}, D(\overline{A}))$ sa fermeture, qui est aussi symétrique. Alors le spectre de \overline{A} est*

- soit égal à tout le plan complexe :

$$\sigma(\overline{A}) = \mathbb{C} ;$$

- soit égal au demi plan supérieur fermé :

$$\sigma(\bar{A}) = \mathbb{C}_+ = \{z \in \mathbb{C} : \Im z \geq 0\} ;$$

- soit égal au demi plan inférieur fermé :

$$\sigma(\bar{A}) = \mathbb{C}_- = \{z \in \mathbb{C} : \Im z \leq 0\} ;$$

- soit inclus dans \mathbb{R} :

$$\sigma(\bar{A}) \subset \mathbb{R}.$$

Dans tous les cas, le spectre ne contient jamais de valeur propre dans $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. C'est-à-dire $\ker(\bar{A} - z) = \{0\}$ si $\Im(z) \neq 0$.

De plus, s'il existe $z \in \mathbb{C}$ avec $\Im(z) \neq 0$ tel que $\text{Im}(A - z) = \mathfrak{H}$, alors $A = \bar{A}$ et $z \in \rho(A)$, de sorte que $\sigma(A)$ est inclus dans le demi-plan ne contenant pas z .

On rappelle que si A n'est pas fermé, alors $\sigma(A) = \mathbb{C}$ (Proposition 2.10). Le théorème fournit l'information que le spectre d'un opérateur symétrique fermé est soit égal à tout \mathbb{C} , soit égal à un demi plan complet, soit inclus dans \mathbb{R} . Il n'y a aucune autre possibilité. De plus, la seule information que $A - z$ est surjectif pour un z avec $\Im(z) \neq 0$, suffit à impliquer que $A = \bar{A}$ et l'absence totale de spectre sur tout le demi-plan auquel appartient z . Nous voyons donc que le spectre des opérateurs symétriques est très rigide et ne peut pas valoir n'importe quel ensemble de \mathbb{C} .

La preuve du théorème repose sur une égalité anodine, qui joue en fait un rôle central dans toute la théorie. Il s'agit du fait que, pour tout $u \in D(A)$ et $a, b \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} \|(A - a - ib)u\|^2 &= \langle (A - a - ib)u, (A - a - ib)u \rangle \\ &= \|(A - a)u\|^2 + b^2 \|u\|^2 - 2b\Im \langle (A - a)u, u \rangle \\ &= \|(A - a)u\|^2 + b^2 \|u\|^2, \end{aligned}$$

où nous avons utilisé que $\langle (A - a)u, u \rangle = \langle u, (A - a)u \rangle = \overline{\langle (A - a)u, u \rangle}$ est réel pour tout opérateur symétrique A . La relation

$$\boxed{\|(A - a - ib)u\|^2 = \|(A - a)u\|^2 + b^2 \|u\|^2 \geq b^2 \|u\|^2} \quad (2.8)$$

implique immédiatement que si $(A - a - ib)u = 0$ avec $b \neq 0$, alors $u = 0$, donc il ne peut pas y avoir de valeur propre non réelle. Elle implique aussi que si l'inverse $(A - a - ib)^{-1}$ existe, alors il est automatiquement borné par

$$\boxed{\|(A - a - ib)^{-1}\| \leq \frac{1}{|b|}.} \quad (2.9)$$

Ainsi, la seule chose qui puisse arriver pour un opérateur symétrique est que $A - a - ib$ ne soit pas surjectif. Mais écrivons maintenant la preuve complète du théorème 2.27.

Démonstration. Nous avons vu au lemme 2.8 que l'ensemble résolvant $\rho(A)$ était ouvert et avons donné une estimée sur le rayon de la boule incluse dans $\rho(A)$ pour tout $z \in \rho(A)$, en fonction de $\|(A-z)^{-1}\|$. Le fait essentiel est que pour un opérateur symétrique, ce rayon est toujours au moins égal à $|b| = |\Im(z)|$, de façon indépendante de l'opérateur A . Ainsi, si l'ensemble résolvant $\rho(\bar{A})$ de l'opérateur symétrique fermé \bar{A} intersecte l'un des demi-plans, disons $\{\Im(z) > 0\}$, alors nous prétendons que tout le demi-plan doit être dans $\rho(\bar{A})$. Supposons par contradiction que $\sigma(\bar{A}) \cap \{z : \Im(z) > 0\}$ n'est pas vide et prenons $z = a + ib \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ dans la frontière de cet ensemble. Il existe alors une suite $z_n = a_n + ib_n \rightarrow z$ avec $z_n \in \rho(A)$. Comme $b_n \rightarrow b$, la boule $B(z_n, |b|/2)$ est alors incluse dans $\rho(A)$, mais comme z appartient à cette boule pour n assez grand on arrive à une contradiction. Ainsi, l'existence d'un point de $\rho(A)$ dans le demi-plan supérieur suffit à garantir l'absence totale de spectre dans ce demi plan. Comme l'argument est le même pour le demi-plan inférieur, ceci montre que le spectre doit satisfaire l'une des quatre possibilités du théorème.

Par ailleurs nous avons déjà vu que les valeurs propres devaient être réelles et que, pour un opérateur symétrique, la seule chose qui pouvait arriver était que $A - z$ ne soit pas surjectif, pour $\Im(z) \neq 0$. Ceci termine la preuve du théorème 2.27. \square

Le lemme suivant permet de ramener la question de la surjectivité de $A - z$ à l'étude du noyau de $A^* - \bar{z}$.

Lemme 2.28. *Soit A un opérateur fermable défini sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Alors*

$$\ker(A^* - \bar{z}) = \text{Im}(A - z)^\perp = \text{Im}(\bar{A} - z)^\perp,$$

pour tout $z \in \mathbb{C}$.

Démonstration. Par définition de A^* , on a $(v, \bar{z}v) \in G(A^*)$ si et seulement si $\langle v, Au \rangle = \langle \bar{z}v, u \rangle = \langle v, zu \rangle$ pour tout $u \in D(A)$, ce qui signifie bien $v \in \text{Im}(A - z)^\perp$. Comme $A^* = \bar{A}^*$ il suit que $\text{Im}(A - z)^\perp = \text{Im}(\bar{A} - z)^\perp$. \square

Ceci nous permet alors de traiter deux exemples.

Exemple 2.29 (Impulsion sur un intervalle : spectre). *On considère l'opérateur symétrique fermé P_0 défini par $P_0 f = -if'$ sur $D(P_0) = H_0^1(]0, 1[)$, que nous avons étudié précédemment. Nous allons montrer ici que*

$$\sigma(P_0) = \mathbb{C}.$$

D'après le théorème 2.27, il suffit de montrer que, par exemple, $\pm i \in \sigma(P_0)$. Le lemme 2.28 suggère d'examiner l'équation $(P_0)^ f = if$. Or nous avons vu que $(P_0)^* = P^{\max}$, l'opérateur défini sur tout $H^1(]0, 1[)$ et on doit donc résoudre $f' = -f$ dans $H^1(]0, 1[)$. L'unique solution est $f_-(x) = e^{-x}$. Cette fonction est bien dans $H^1(]0, 1[)$ mais elle n'appartient pas à $D(P_0) =$*

$H_0^1(]0, 1[)$. Même si elle n'est pas une fonction propre de $P_0 + i$, nous avons $\text{Im}(P_0 + i)^\perp = \text{vect}\{f_-\}$ donc $P_0 + i$ n'est pas surjectif et $-i \in \sigma(P_0)$. Le même argument avec la fonction $f_+(x) = e^x$ montre que $+i \in \sigma(P_0)$, ce qui termine la preuve.

Remarque : On peut bien sûr utiliser cet argument directement pour tout $z \in \mathbb{C}$ et obtenir $\sigma(P_0) = \mathbb{C}$ sans recourir au théorème 2.27.

Exemple 2.30 (Impulsion sur la demi-droite : spectre). *Considérons maintenant l'opérateur P_0 défini cette fois sur la demi-droite par $P_0 f = -i f'$ sur $D(P_0) = H_0^1(]0, +\infty[)$. Le même argument que précédemment montre que $f_- \in \ker((P_0)^* - i) = \text{Im}(P_0 + i)^\perp$, donc que $-i \in \sigma(P_0)$. En conséquence, $\sigma(P_0)$ doit contenir tout le demi-plan inférieur, par le théorème 2.27. Cependant la fonction $f_+(x) = e^x$ n'appartient pas à L^2 car elle n'est pas intégrable à l'infini. On a donc $\ker((P_0)^* + i) = \{0\}$, ce qui montre que $\text{Im}(P_0 - i)$ est dense dans $L^2(]0, 1[)$. On peut vérifier que cet espace est en fait fermé, ce qui implique donc*

$$\boxed{\sigma(P_0) = \mathbb{C}_-}$$

Une autre façon de comprendre le fait que le demi-plan supérieur ne contient aucun élément du spectre est de résoudre explicitement l'équation $(P_0 - z)u = v$ pour $\Im(z) > 0$, c'est-à-dire de déterminer $(P_0 - z)^{-1}$. Comme u doit appartenir à $L^2(]0, \infty[)$, on trouve par la variation des constantes

$$u(x) = i \int_0^x e^{iz(x-y)} v(y) dy,$$

qui définit bien un opérateur borné de $L^2(]0, \infty[)$ dans $H_0^1(]0, \infty[)$ puisque $x \mapsto e^{izx}$ est dans $L^1(]0, \infty[)$ lorsque $\Im(z) > 0$.

Exemple 2.31 (Laplacien sur un intervalle : spectre). *L'opérateur $A_0 f = -f''$ est symétrique fermé sur son domaine $D(A_0) = H_0^2(]0, 1[)$. En raisonnant comme précédemment, nous pouvons montrer que*

$$\sigma(A_0) = \mathbb{C}.$$

En effet, considérons la fonction $g(t) = e^{i\bar{z}t}$ avec z un nombre complexe quelconque, qui appartient à $\ker(A_0^{\max} - \bar{z}^2)$. Cette fonction est bien dans $H^2(]0, 1[)$ mais elle n'appartient pas à $H_0^2(]0, 1[)$. On trouve $\langle g, (A_0 - z^2)f \rangle = 0$ pour tout $f \in D(A_0)$, de sorte que $z^2 \in \sigma(A_0)$ pour tout $z \in \mathbb{C}$. Ceci montre bien que $\sigma(A_0) = \mathbb{C}$.

2.6 Auto-adjonction

Il est maintenant temps d'introduire la notion d'auto-adjonction.

Définition 2.32 (Auto-adjonction). *On dit qu'un opérateur A , défini sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$, est auto-adjoint lorsqu'on a $A = A^*$, ce qui signifie que A est*

symétrique ($A \subset A^*$) et que $D(A^*) = \overline{D(A)}$. On dit qu'il est essentiellement auto-adjoint s'il est symétrique et \overline{A} est auto-adjoint.

Rappelons que pour tout opérateur symétrique A on a $A \subset A^*$, ce qui signifie qu'on a l'inclusion des graphes

$$\{(v, Av) \in D(A) \times \mathfrak{H}\} \subset \{(Aw, -w) \in \mathfrak{H} \times D(A)\}^\perp = G(A^*). \quad (2.10)$$

Lorsque l'espace de Hilbert ambiant \mathfrak{H} est de dimension finie d , le graphe et le graphe tourné sont des sous-espaces de dimension d de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$. Comme $\dim(\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}) = 2d$, l'orthogonal à droite est aussi de dimension d . Ainsi, en dimension finie les deux ensembles de (2.10) sont nécessairement égaux pour une matrice symétrique. En dimension infinie, les deux espaces ne sont pas forcément égaux et l'auto-adjonction s'exprime sous la forme

$$\boxed{\{(v, Av) \in D(A) \times \mathfrak{H}\} = \{(Aw, -w) \in \mathfrak{H} \times D(A)\}^\perp.} \quad (2.11)$$

Notons qu'un opérateur auto-adjoint n'a jamais d'extension ou de restriction auto-adjointe. Ainsi, il n'est jamais possible de diminuer ou d'augmenter le domaine d'un opérateur auto-adjoint en conservant l'auto-adjonction. En effet, rappelons que si $A \subset B$, alors $B^* \subset A^*$, de sorte que les égalités $A = A^*$ et $B = B^*$ impliquent immédiatement $A = B$.

Si A est un opérateur symétrique, les extensions auto-adjointes de A sont toutes situées entre \overline{A} et A^* , puisqu'elles sont symétriques fermées et comme nous l'avons expliqué à la section précédente. Nous avons dit également que A^* n'est pas forcément symétrique. Il se trouve que la symétrie de A^* équivaut à l'auto-adjonction de \overline{A} , c'est-à-dire au caractère essentiellement auto-adjoint de A .

Exercice 2.33. Soit $(A, D(A))$ un opérateur symétrique. Montrer que \overline{A} est auto-adjoint si et seulement si A^* est symétrique.

Exemple 2.34 ($-id/dx$ n'est pas auto-adjoint sur $H_0^1(]0, 1[)$). L'opérateur P_0 qui est la réalisation de $f \mapsto -if'$ sur le domaine $D(P_0) = H_0^1(]0, 1[)$ n'est pas auto-adjoint car nous avons vu en (2.7) à l'exercice 2.21 que son adjoint est P^{\max} défini sur le domaine $D(P^{\max}) = H^1(]0, 1[)$. C'est une extension stricte de P_0 qui n'est même pas symétrique. Nous verrons à la section 2.8.1 comment décrire toutes les extensions auto-adjointes de P^{\min} , qui vérifient toutes

$$\overline{P^{\min}} = P_0 \subsetneq P = P^* \subsetneq P^{\max} = (P^{\min})^*$$

car elles sont symétriques fermées.

Un autre exemple facile est celui d'un opérateur symétrique défini sur tout \mathfrak{H} , qui est automatiquement auto-adjoint.

Proposition 2.35 (Opérateurs auto-adjoints bornés). *Si A est défini sur tout $D(A) = \mathfrak{H}$ et est symétrique, alors A est auto-adjoint et borné.*

Démonstration. Comme $D(A) \subset D(A^*)$ puisque A est supposé symétrique, on a immédiatement $D(A) = D(A^*)$ lorsque $D(A) = \mathfrak{H}$. Donc A est auto-adjoint. En particulier, A est fermé donc, par le théorème du graphe fermé, cela signifie que A est continu, donc borné. \square

Pour des opérateurs définis sur un domaine strict $D(A)$ de \mathfrak{H} , la notion d'auto-adjonction introduite précédemment est totalement justifiée par le théorème suivant.

Théorème 2.36 (Caractérisation des opérateurs auto-adjoints). *Soit A un opérateur symétrique défini sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

1. *A est auto-adjoint, c'est-à-dire vérifie $D(A^*) = D(A)$;*
2. *le spectre de A est réel : $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$;*
3. *il existe $\lambda \in \mathbb{C}$ tel que $A - \lambda$ et $A - \bar{\lambda}$ soient tous les deux surjectifs, de $D(A)$ dans \mathfrak{H} .*

Si on revient au théorème 2.27 fournissant la forme du spectre des opérateurs symétriques fermés, nous voyons que seul le cas où $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ correspond à celui d'un opérateur auto-adjoint. L'équivalence entre la relation abstraite $D(A) = D(A^*)$ et le caractère réel du spectre montre que la théorie développée jusqu'à présent est nécessaire. En plus d'imiter le cas de la dimension finie, avoir un spectre réel est extrêmement important d'un point de vue pratique car c'est l'un des fondements de la mécanique quantique, comme nous l'avons discuté rapidement à la section 1.6. Si on désire avoir un spectre réel, il faut donc travailler avec des opérateurs vérifiant $D(A) = D(A^*)$. Ceci impose en particulier l'utilisation des espaces de Sobolev et des dérivées faibles.

Si l'assertion 2 du théorème est très réconfortante du point de vue de la théorie, l'assertion 3 est elle très utile d'un point de vue pratique et sera fréquemment utilisée dans la suite du cours. Elle est en effet beaucoup plus rapide à vérifier que 2 puisque si $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ alors $A - a - ib$ et $A - a + ib$ sont surjectifs pour tous $a \in \mathbb{R}$ et tous $b \in \mathbb{R}^*$. Notons que l'équivalence entre les assertions 2 et 3 suit immédiatement du théorème 2.27.

La preuve du théorème 2.36 repose à nouveau grandement sur la relation fondamentale (2.8) vue à la section précédente.

Preuve du théorème 2.36. Soit A un opérateur auto-adjoint et montrons l'assertion 2, c'est-à-dire que $A - \lambda : D(A) \rightarrow \mathfrak{H}$ est inversible d'inverse borné, pour tout $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. En fait, d'après le théorème 2.27 il suffit de le faire pour $\pm i$, par exemple (mais la preuve est exactement la même pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$). Le même théorème nous précise que A n'a aucune valeur

propre non réelle, de sorte que $\ker(A \pm i) = \{0\}$. Or, d'après le lemme 2.28, on a $\ker(A \pm i) = \ker(A^* \pm i) = \text{Im}(A \mp i)^\perp$, ce qui montre que $A \pm i$ est d'image dense. Pour voir que $\text{Im}(A \pm i)$ est fermée (donc finalement égale à tout \mathfrak{H}), nous pouvons utiliser la relation (2.8). En effet, si $(A \pm i)v_n \rightarrow w$, on a

$$\|v_n - v_p\| \leq \|(A \pm i)(v_n - v_p)\|$$

qui montre que v_n est de Cauchy, donc converge vers un vecteur v dans \mathfrak{H} . Comme $A = A^*$ est fermé, on conclut bien que $v \in D(A)$ et que $(A \pm i)v = w$, c'est-à-dire que $\text{Im}(A \pm i)$ est fermée, donc égale à tout \mathfrak{H} . À nouveau par le théorème 2.27, nous en déduisons bien que $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

Comme l'assertion 2 implique évidemment 3, il reste à prouver que 3 implique 1. On suppose maintenant que $A - \lambda$ et $A - \bar{\lambda}$ sont surjectifs pour un $\lambda \in \mathbb{C}$ (réel ou pas) et on désire montrer que A est auto-adjoint, c'est-à-dire l'inclusion \supset dans (2.11). Soit $(v, w = A^*v) \in G(A^*) = \{(Az, -z), z \in D(A)\}^\perp$, c'est-à-dire tel que $\langle v, Az \rangle = \langle w, z \rangle$ pour tout $z \in D(A)$. Comme $A - \bar{\lambda}$ est surjectif par hypothèse, il existe $y \in D(A)$ tel que $w - \bar{\lambda}v = (A - \bar{\lambda})y$ et on obtient

$$\langle v, (A - \lambda)z \rangle = \langle w - \bar{\lambda}v, z \rangle = \langle (A - \bar{\lambda})y, z \rangle = \langle y, (A - \lambda)z \rangle,$$

puisque $z \in D(A)$ et que A est symétrique. Par ailleurs $A - \lambda$ est aussi surjectif, donc on peut trouver $z \in D(A)$ tel que $(A - \lambda)z = y - v$. On en déduit alors que $y = v$ et donc que $v \in D(A)$ et $w = Av$. \square

Exercice 2.37 (Caractérisation des opérateurs essentiellement auto-adjoints). *Soit A un opérateur symétrique défini sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Montrer que A est essentiellement auto-adjoint (c'est-à-dire \bar{A} est auto-adjoint) si et seulement s'il existe $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ tel que $A - \lambda$ et $A - \bar{\lambda}$ soient tous les deux d'image dense dans \mathfrak{H} .*

Voici maintenant un résultat qui permet de donner une interprétation du spectre des opérateurs auto-adjoints en dimension infinie.

Théorème 2.38 (Spectre des opérateurs auto-adjoints). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, et $\lambda \in \mathbb{R}$. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

1. $\lambda \in \sigma(A)$;
2. $\inf_{\substack{v \in D(A) \\ \|v\|=1}} \|(A - \lambda)v\| = 0$;
3. *il existe une suite $(v_n) \subset D(A)$ telle que $\|v_n\| = 1$ et $\|(A - \lambda)v_n\| \rightarrow 0$.*

Ce résultat nous donne une interprétation très utile du spectre. La troisième assertion nous précise ainsi que les éléments du spectre sont tous des “quasi-valeurs propres” au sens où on peut résoudre l'équation $Av = \lambda v$ de manière

approchée avec une suite v_n , sans nécessairement pouvoir passer à la limite et trouver réellement une solution. En dimension finie, comme la sphère unité est compacte et A est continue, on peut bien sûr toujours passer à la limite et il n'y a que des valeurs propres.

Définition 2.39 (Suite de Weyl). *Une suite (v_n) satisfaisant les propriétés du point 3. du théorème 2.38 est appelée suite de Weyl.*

Démonstration du théorème 2.38. L'équivalence entre les assertions 2. et 3. suit de la définition de l'infimum. Si 2. est vraie, il est clair que l'inverse de $A - \lambda$, s'il existe, ne peut être borné, puisque ceci impliquerait $\|(A - \lambda)^{-1}w\| \leq C\|w\|$ et donc $1 = \|v\| \leq C\|(A - \lambda)v\|$ en prenant $w = (A - \lambda)v$ avec $\|v\| = 1$, qui contredirait le fait que l'infimum dans 2. vaut 0. Donc λ est nécessairement dans le spectre.

Réciproquement, si l'infimum dans 2. vaut $\varepsilon > 0$, alors $\|(A - \lambda)v\| \geq \varepsilon\|v\|$ pour tout $v \in D(A)$. Cette inégalité joue alors un rôle similaire à notre relation fondamentale (2.8), mais avec λ réel. En effet, ceci implique évidemment que $\ker(A - \lambda) = \{0\}$ et donc, par le lemme 2.28, que $A - \lambda$ est d'image dense. Mais avec le même argument qu'au début de la preuve du théorème 2.36, on conclut que l'image est fermée et que l'inverse est borné par $1/\varepsilon$. Ceci montre donc que $\lambda \notin \sigma(A)$. \square

Remarque 2.40. *Si (x_n) est une suite de Weyl, alors (x_n) admet des sous-suites qui convergent faiblement dans \mathfrak{H} , puisque x_n est bornée. Il se trouve qu'on peut passer à la limite dans l'équation $(A - \lambda)x_n \rightarrow 0$ et en déduire que les limites faibles sont toutes nécessairement dans $\ker(A - \lambda)$. En particulier, si λ appartient au spectre de l'opérateur auto-adjoint A mais n'est pas une valeur propre, on en déduit que $x_n \rightarrow 0$ pour toute suite de Weyl associée à λ . Pour justifier le passage à la limite, on peut utiliser l'argument suivant. On prend le produit scalaire contre un vecteur fixe $y \in D(A)$ et on trouve, grâce à la symétrie de A ,*

$$0 = \lim_{n_k \rightarrow \infty} \langle y, (A - \lambda)x_{n_k} \rangle = \lim_{n_k \rightarrow \infty} \langle (A - \lambda)y, x_{n_k} \rangle = \langle (A - \lambda)y, x \rangle$$

en supposant que $x_{n_k} \rightharpoonup x$ faiblement dans \mathfrak{H} et en utilisant que $(A - \lambda)x_n \rightarrow 0$ fortement. Ceci montre que $\langle Ay, x \rangle = \lambda \langle y, x \rangle$ pour tout $y \in D(A)$, donc que $(x, \lambda x) \in G(A^)$. Comme A est supposé auto-adjoint, on en déduit bien que $x \in D(A)$ et que $Ax = \lambda x$.*

Nous donnons maintenant une conséquence intéressante du théorème 2.38, avant de traiter des exemples.

Corollaire 2.41 (Localisation du spectre). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$ et $a \in \mathbb{R}$. Si $\langle v, Av \rangle \geq a\|v\|^2$ pour tout $v \in D(A)$, alors $\sigma(A) \subset [a, +\infty[$.*

La réciproque est également vraie, ce que nous verrons plus tard au corollaire 4.9.

Démonstration. Soit $\lambda \in \sigma(A)$ et (v_n) une suite comme au théorème 2.38. Comme $Av_n - \lambda v_n \rightarrow 0$ et que $\|v_n\| = 1$, on en déduit par l'inégalité de Cauchy-Schwarz que $\langle v_n, Av_n - \lambda v_n \rangle = \langle v_n, Av_n \rangle - \lambda \rightarrow 0$. Comme $\langle v_n, Av_n \rangle \geq a\|v_n\|^2 = a$ par hypothèse, on conclut bien que $\lambda \geq a$. \square

2.7 Impulsion et Laplacien sur \mathbb{R}^d

Voici des exemples très importants d'opérateurs auto-adjoints.

Corollaire 2.42 (Impulsion et laplacien sur \mathbb{R}^d). *Les opérateurs $P_j = -i\partial_{x_j}$ définis sur $D(P_j) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^d) : \partial_{x_j} f \in L^2(\mathbb{R}^d)\} \subset \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ pour $j = 1, \dots, d$ sont auto-adjoints et leur spectre est*

$$\sigma(P_j) = \mathbb{R}.$$

L'opérateur $A = -\Delta$ défini sur $D(A) = H^2(\mathbb{R}^d) \subset \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ est auto-adjoint et son spectre est

$$\sigma(-\Delta) = [0, +\infty).$$

Les opérateurs P_j et A ne possèdent aucune valeur propre.

Démonstration. Écrivons la preuve pour le Laplacien, celle pour P_j est très similaire. Il est classique que l'opérateur $-\Delta$ est symétrique sur $H^2(\mathbb{R}^d)$. En effet, on a après une intégration par parties

$$-\int_{\mathbb{R}^d} \overline{g(x)} \Delta f(x) dx = -\int_{\mathbb{R}^d} \overline{\Delta g(x)} f(x) dx,$$

pour tous $f, g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et l'égalité suit alors dans $H^2(\mathbb{R}^d)$, en utilisant que $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ est dense dans cet espace.

D'après le théorème 2.36 avec $\lambda = -1 = \bar{\lambda}$, il suffit alors de montrer que pour tout $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$ il existe une fonction $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$ telle que $(1 - \Delta)f = g$. En passant à la transformée de Fourier, on trouve que

$$(1 + |k|^2)\widehat{f}(k) = \widehat{g}(k),$$

donc la fonction

$$f = \mathcal{F}^{-1} \left(\frac{\widehat{g}(k)}{1 + |k|^2} \right)$$

convient. Elle est bien dans $H^2(\mathbb{R}^d)$ par la caractérisation de cet espace rappelée à l'appendice A, puisque $(1 + |k|^2)\widehat{f}(k) = \widehat{g}(k) \in L^2(\mathbb{R}^d)$.

En fait, nous avons choisi $\lambda = -1$ par soucis de simplicité, mais l'argument précédent montre aisément que $(-\Delta - \lambda)$ est inversible d'inverse

borné pour tout $\lambda < 0$, donc que $\sigma(A) \subset \mathbb{R}^+$. Montrons maintenant l'inclusion réciproque. Pour tout $k_0 \in \mathbb{R}^d$ et toute fonction $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$ normalisée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, considérons la suite de fonctions

$$f_n(x) = n^{-d/2} f\left(\frac{x}{n}\right) e^{ix \cdot k_0},$$

dont la transformée de Fourier vaut

$$\widehat{f}_n(k) = n^{d/2} \widehat{f}(n(k - k_0)).$$

Nous avons défini f_n pour que $|\widehat{f}_n|^2 \rightharpoonup \delta_{k_0}$ au sens des mesures. On a alors

$$\begin{aligned} \|(-\Delta - |k_0|^2)f_n\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} (|k|^2 - |k_0|^2)^2 |\widehat{f}_n(k)|^2 dk \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \left(\left|k_0 + \frac{p}{n}\right|^2 - |k_0|^2 \right)^2 |\widehat{f}(p)|^2 dp \\ &= \frac{1}{n} \int_{\mathbb{R}^d} \left(2p \cdot k_0 + \frac{|p|^2}{n} \right)^2 |\widehat{f}(p)|^2 dp, \end{aligned}$$

qui tend vers 0 quand $n \rightarrow \infty$ et montre, d'après le théorème 2.38, que $|k_0|^2$ appartient à $\sigma(-\Delta)$ pour tout $k_0 \in \mathbb{R}^d$. Comme $|k_0|^2$ parcourt tout \mathbb{R}^+ , nous avons bien démontré que $\sigma(-\Delta) = \mathbb{R}^+$. Le spectre ne contient aucune valeur propre car si on a $(-\Delta - \lambda)f = 0$ pour un $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$, alors on déduit de

$$\|(-\Delta - \lambda)f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = \int_{\mathbb{R}^d} (|k|^2 - \lambda)^2 |\widehat{f}(k)|^2 dk$$

que la transformée de Fourier \widehat{f} est supportée dans la sphère de rayon $\sqrt{\lambda}$. Comme cette dernière est de mesure nulle, il suit que $f \equiv 0$. \square

Exercice 2.43 (Dérivation). *Écrire la preuve du théorème pour P_j .*

2.8 Impulsion et Laplacien sur $]0, 1[$: réalisations auto-adjointes

Dans cette section, nous terminons l'étude détaillée des opérateurs

$$P = -i \frac{d}{dx} \quad \text{et} \quad A = -\frac{d^2}{dx^2} \quad \text{sur} \quad L^2(]0, 1[)$$

qui est très instructive et illustre bien les notions introduites aux sections précédentes. Nous avons déjà trouvé la fermeture de ces opérateurs définis préalablement sur $C_c^\infty(]0, 1[)$ et leur adjoint. Nous déterminons maintenant toutes leurs extensions auto-adjointes possibles.

2.8.1 $P = -id/dx$ sur $]0, 1[$

Nous cherchons les extensions auto-adjointes de l'opérateur P^{\min} défini par

$$P^{\min} f = -if', \quad D(P^{\min}) = C_c^\infty(]0, 1[).$$

C'est un opérateur symétrique dont nous avons déterminé la fermeture $P_0 = \overline{P^{\min}}$ à l'exemple 2.14, donnée par

$$P_0 f = -if', \quad D(P_0) = H_0^1(]0, 1[)$$

et qui est également symétrique. Finalement, nous avons trouvé l'adjoint à l'exemple 2.21, qui est l'opérateur $P^{\max} = (P_0)^* = (P^{\min})^*$ donné par

$$P^{\max} f = -if', \quad D(P^{\max}) = H^1(]0, 1[).$$

Cet opérateur n'est pas symétrique car les termes de bord ne s'éliminent pas quand on fait une intégration par parties. Ceci provient du fait que P_0 n'est pas auto-adjoint.

Rappelons en passant que les fonctions de $H^1(]0, 1[)$ sont toutes continues jusqu'au deux points du bord de l'intervalle, d'après le lemme A.2, et que l'application

$$f \in H^1(]0, 1[) \mapsto (f(0), f(1)) \in \mathbb{C}^2 \quad (2.12)$$

est donc continue.

Nous voulons déterminer toutes les extensions auto-adjointes de P^{\min} , qui vérifient nécessairement

$$\overline{P^{\min}} = P_0 \subsetneq P = P^* \subsetneq P^{\max}.$$

Ce sont toutes les réalisations auto-adjointes possibles de $f \mapsto -if'$ sur l'intervalle $]0, 1[$.

Théorème 2.44 (Impulsion sur $]0, 1[$: auto-adjonction et spectre). *Les extensions symétriques strictes de P_0 sont les opérateurs $P_{\text{per},\theta}$ définis par*

$$P_{\text{per},\theta} f = -if',$$

sur le domaine

$$D(P_{\text{per},\theta}) = H_{\text{per},\theta}^1(]0, 1[) := \left\{ f \in H^1(]0, 1[) : f(1) = e^{i\theta} f(0) \right\}$$

où θ varie dans $[0, 2\pi[$. Ces opérateurs sont tous auto-adjoints et leur spectre est le réseau $2\pi\mathbb{Z}$ translaté de θ :

$$\sigma(P_{\text{per},\theta}) = \{k + \theta, k \in 2\pi\mathbb{Z}\}.$$

Chaque élément $k + \theta$ du spectre est une valeur propre simple, de fonction propre associée $x \mapsto e^{i(k+\theta)x}$.

Lorsque $\theta = 0$ nous trouvons la condition de périodicité $f(1) = f(0)$, qui décrit également une particule évoluant sur un cercle. La condition au bord $f(1) = e^{i\theta} f(0)$ est souvent appelée *condition de Born-von Karman* et elle intervient dans le calcul du spectre des opérateurs périodiques, par la théorie de Bloch-Floquet.

Le théorème précise que les conditions au bord de Born-von Karman sont les seules possibles pour que l'opérateur $-id/dx$ soit auto-adjoint sur un intervalle borné. Par exemple, la condition de Dirichlet $f(0) = f(1) = 0$ fournit l'opérateur P_0 qui n'est pas auto-adjoint.

Démonstration. Soit P une extension symétrique de P_0 . Comme on a alors $\langle P_0 f, g \rangle = \langle P f, g \rangle = \langle f, P g \rangle$ pour tout $u \in H_0^1(]0, 1[)$, nous voyons que $P f = -if'$ et que son domaine est $D(P) \subset H^1(]0, 1[)$. Ceci suit également du fait que P est une restriction de $(P_0)^*$. La condition de symétrie s'écrit, après intégration par parties,

$$\overline{f(1)}g(1) = \overline{f(0)}g(0), \quad \forall f, g \in D(P) \subset H^1(]0, 1[). \quad (2.13)$$

En prenant $f = g$, on trouve en particulier que $|f(1)|^2 = |f(0)|^2$ pour tout $f \in D(P)$. Comme on a supposé que P est une extension stricte de P_0 (pour lequel $f(0) = f(1) = 0$), il existe au moins une fonction $f_0 \in D(P)$ telle que $|f_0(0)| = |f_0(1)| \neq 0$. En écrivant alors $f_0(1)/f_0(0) = e^{-i\theta}$, nous trouvons que $g(1) = e^{i\theta}g(0)$ pour tout $g \in D(P)$. Ceci montre que $P \subset P_{\text{per},\theta}$ comme défini dans l'énoncé. Les opérateurs $P_{\text{per},\theta}$ sont symétriques (car ils vérifient la condition ci-dessus) et fermés. Or, on peut écrire toute fonction $f \in H_{\text{per},\theta}^1(]0, 1[)$ sous la forme

$$f(x) = \frac{f(0)}{f_0(0)} f_0(x) + \underbrace{f(x) - \frac{f(0)}{f_0(0)} f_0(x)}_{\in H_0^1(]0, 1[)}.$$

Ceci montre que tout sous-espace contenant f_0 et $H_0^1(]0, 1[)$ doit contenir tout $H_{\text{per},\theta}^1(]0, 1[)$. Comme c'est le cas de $D(P)$, on a $P_{\text{per},\theta} \subset P$ et on conclut bien, comme annoncé, que $P = P_{\text{per},\theta}$.

Pour montrer l'auto-adjonction des opérateurs $P_{\text{per},\theta}$, on utilise simplement la définition. On a $g \in D((P_{\text{per},\theta})^*)$ si et seulement si $\langle g, -ih' \rangle = \langle -ig', h \rangle$ pour tout $h \in D(P_{\text{per},\theta})$. Après une intégration par parties, ceci fournit la condition

$$\overline{g(1)}h(1) = \overline{g(0)}h(0), \quad \forall g \in D((P_{\text{per},\theta})^*), \quad h \in H_{\text{per},\theta}^1(]0, 1[).$$

En prenant $h = f_0$ (ou n'importe quelle autre fonction de $H_{\text{per},\theta}^1(]0, 1[)$ qui ne s'annule pas en 0), on trouve que $g(1) = e^{i\theta}g(0)$, c'est-à-dire que $(P_{\text{per},\theta})^* \subset P_{\text{per},\theta}$. Ainsi $P_{\text{per},\theta}$ est auto-adjoint.

Lorsque $\theta = 0$ on trouve le problème périodique qui possède une base de vecteurs propres explicite, donnée par les modes de Fourier. Plus précisément, en posant $e_k(x) = e^{ikx}$ pour $k \in 2\pi\mathbb{Z}$, nous voyons que e_k est une base orthonormée de $L^2(]0, 1[)$, composée uniquement de vecteurs de $H_{\text{per}}^1(]0, 1[)$ (nous omettons θ en indice dans le cas $\theta = 0$). Par ailleurs on a évidemment $P_{\text{per}}e_k = ke_k$, de sorte que $2\pi\mathbb{Z} \subset \sigma(P_{\text{per}})$. Pour montrer l'inclusion inverse, il faut prouver que $P_{\text{per}} - \lambda$ est inversible d'inverse borné pour tout $\lambda \in 2\pi\mathbb{Z} \setminus \mathbb{R}$. L'inverse est donné par la théorie des séries de Fourier, comme nous avons utilisé la transformée de Fourier pour le cas de tout l'espace \mathbb{R}^d à la section précédente. Il est donné par la formule explicite

$$f = (P_{\text{per}} - \lambda)^{-1}g = \sum_{k \in 2\pi\mathbb{Z}} \frac{\langle e_k, g \rangle}{k - \lambda} e_k, \quad \forall g \in L^2(]0, 1[), \quad (2.14)$$

et nous laissons la fin du raisonnement en exercice. Le cas de $\theta \neq 0$ est exactement similaire, en utilisant la base orthonormée $\tilde{e}_k(x) = e^{i(k+\theta)x}$ qui est l'image de la base de Fourier par l'isométrie $f \mapsto e^{i\theta x}f$. \square

Exercice 2.45 ($-id/dx$ n'admet aucune réalisation auto-adjointe sur $[0, \infty)$). Montrer que l'opérateur P^{\min} défini par $f \mapsto -if'$ sur $D(P^{\min}) = C_c^\infty(]0, \infty[)$ n'admet aucune extension auto-adjointe. Plus précisément, montrer en s'inspirant des résultats de cette section, que sa seule extension symétrique fermée est P_0 , définie sur $H_0^1(]0, +\infty[)$, ce qui permet de conclure car $(P_0)^* = P^{\max} \neq P_0$.

2.8.2 $A = -d^2/dx^2$ sur $]0, 1[$

Nous cherchons maintenant les extensions auto-adjointes du Laplacien

$$A^{\min}f = -f'', \quad D(A^{\min}) = C_c^\infty(]0, 1[)$$

dont nous avons montré à l'exemple 2.16 que sa fermeture est donnée par $A_0f = -f''$ sur le domaine

$$D(A_0) = H_0^2(]0, 1[) = \{f \in H^2(]0, 1[) : f(0) = f'(0) = f(1) = f'(1) = 0\}$$

et à l'exercice 2.22 que son adjoint $A^{\max} = (A_0)^* = (A^{\min})^*$ vaut

$$A^{\max}f = -f'', \quad D(A^{\max}) = H^2(]0, 1[).$$

Comme à la section précédente, les extensions symétriques A de A_0 doivent vérifier

$$\overline{g'(1)}f(1) - \overline{g(1)}f'(1) + \overline{g(0)}f'(0) - \overline{g'(0)}f(0) = 0, \quad \forall f, g \in D(A).$$

Cette condition peut encore s'écrire sous forme matricielle

$$\left\langle \begin{pmatrix} g(0) \\ g'(0) \\ g(1) \\ g'(1) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(0) \\ f'(0) \\ f(1) \\ f'(1) \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{C}^4} = 0$$

et signifie que $V := \{(f(0), f'(0), f(1), f'(1)) \in \mathbb{C}^4 : f \in D(A)\}$ est un sous-espace isotrope de la forme symplectique associée à la matrice 4×4

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Rappelons qu'un espace isotrope de M est par définition un sous-espace de \mathbb{C}^4 tel que $\langle v, Mv \rangle_{\mathbb{C}^4} = 0$ pour tout $v \in V$ qui, par polarisation, est équivalent à $\langle w, Mv \rangle_{\mathbb{C}^4} = 0$ pour tout $v, w \in V$.

Ceci suggère d'introduire les opérateurs A_V définis par

$$\boxed{A_V f = -f'', \quad D(A_V) = \left\{ f \in H^2(]0, 1[) : (f(0), f'(0), f(1), f'(1)) \in V \right\}} \quad (2.16)$$

pour tout sous-espace isotrope V de la matrice M . Ces opérateurs sont symétriques et fermés. Reste maintenant à déterminer les sous-espaces isotropes de M pour lesquels A_V est auto-adjoint. Pour cela, on commence par remarquer que M est inversible. Ainsi, $\langle w, Mv \rangle_{\mathbb{C}^4} = 0$ pour tous $v, w \in V$ signifie que $V \subset (MV)^\perp$. Comme $\dim(MV)^\perp = 4 - \dim(MV) = 4 - \dim(V)$, on conclut que $\dim(V) \leq 2$. Les sous-espaces isotropes sont tous de dimension au plus 2. Par exemple, pour $V = \{0\}$ on trouve les conditions au bord $f(0) = f'(0) = f(1) = f'(1) = 0$ et on a alors $D(A_V) = H_0^2(]0, 1[)$, c'est-à-dire $A_V = A_0$. Le tableau 2.1 recense quelques exemples célèbres de conditions au bord avec V de dimension deux.

Dirichlet	$f(0) = f(1) = 0$	$V = \text{Vect}(e_2, e_4)$
Neumann	$f'(0) = f'(1) = 0$	$V = \text{Vect}(e_1, e_3)$
Périodique	$f(0) = f(1)$ et $f'(0) = f'(1)$	$V = \text{Vect}(e_1 + e_3, e_2 + e_4)$
Robin	$af(0) - bf'(0) = af(1) + bf'(1) = 0$ $(a, b) \in \mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\}$	$V = \text{Vect}(be_1 + ae_2,$ $be_3 - ae_4)$
Born-von Karman	$e^{i\theta} f(0) - f(1) = e^{i\theta} f'(0) - f'(1) = 0$ $\theta \in [0, 2\pi[$	$V = \text{Vect}(e_1 + e^{i\theta} e_3,$ $e_2 + e^{i\theta} e_4)$

TABLE 2.1 – Quelques conditions au bord classiques avec V de dimension 2.

Nous pouvons maintenant caractériser les réalisations auto-adjointes du Laplacien sur $]0, 1[$. Le théorème suivant précise que l'on doit choisir exactement deux conditions au bord pour que l'opérateur obtenu soit auto-adjoint.

Théorème 2.46 (Laplacien sur $]0, 1[$). *Les extensions symétriques de A_0 sont exactement les opérateurs A_V introduits en (2.16), lorsque V parcourt tous les sous-espaces isotropes de la matrice M . Le domaine de A_V peut s'écrire*

$$\boxed{D(A_V) = H_0^2(]0, 1[) + \text{vect}(f_i),} \quad (2.17)$$

où $f_i \in H^2(]0,1[)$ sont des fonctions quelconques choisies pour que les $(f_i(0), f'_i(0), f_i(1), f'_i(1))$ forment une base de V . On a

$$\boxed{A_V \text{ auto-adjoint} \iff \dim(V) = 2.}$$

Lorsque $\dim(V) \in \{0, 1\}$, on a

$$\boxed{\sigma(A_V) = \mathbb{C}.}$$

Ce résultat confirme l'intuition que le domaine doit être choisi assez grand pour que l'égalité soit satisfaite dans (2.11). Il y a donc une sorte de compétition entre l'hypothèse de symétrie qui nécessite que V ne soit pas trop grand, de sorte que les termes de bord disparaissent dans l'intégration par parties, et l'auto-adjonction qui requiert elle que V soit assez grand. Seuls les espaces isotropes de dimension 2 sont alors admissibles et ce sont les conditions aux bords que nous devons considérer physiquement. Ce sont les seules pour lesquelles le spectre de A_V est réel, comme en dimension finie.

Quelle condition au bord utiliser ou étudier ? En principe aucune n'est meilleure que les autres et elles ont toutes leurs particularités. Le choix d'une condition est toujours motivé par des considérations pratiques liées au modèle étudié. Par exemple si l'on désire décrire les vibrations d'une corde qui est attachée à ses deux extrémités, on choisira bien sûr la condition de Dirichlet. Comme nous l'avons mentionné pour $P = -id/dx$, la condition de Born-von Karman (qui inclut la condition périodique) intervient naturellement lorsqu'on étudie des systèmes périodiques, en lien avec la transformation de Bloch-Floquet. La condition de Robin intervient elle souvent en électromagnétisme, où elle est parfois appelée condition d'impédance ou condition de Gennes.

Démonstration. Il faut commencer par montrer que les extensions symétriques de A_0 sont exactement les A_V . Soit A une telle extension. On a alors $\langle A_0 f, g \rangle = \langle A f, g \rangle = \langle f, A g \rangle$ pour tout $f \in H_0^2(]0,1[)$ et tout $g \in D(A)$, ce qui fournit l'information que $A g = -g''$ et que $D(A) \subset H^2(]0,1[)$. La condition de symétrie signifie alors, après intégration par parties que le sous-espace

$$V = \{(f(0), f'(0), f(1), f'(1)), \quad f \in D(A)\}$$

de \mathbb{C}^4 , est un sous-espace isotrope de M , c'est-à-dire que $A \subset A_V$. Il reste à montrer l'inclusion inverse. Soit v_i une base de V et f_i des fonctions de $D(A)$ telles que $v_i = (f_i(0), f'_i(0), f_i(1), f'_i(1))$. Toute fonction de $D(A_V)$ peut s'écrire sous la forme

$$f(x) = \sum_i \alpha_i f_i(x) + \underbrace{f(x) - \sum_i \alpha_i f_i(x)}_{\in H_0^2(]0,1[)} \quad (2.18)$$

où les α_i sont choisis de sorte que

$$(f(0), f'(0), f(1), f'(1)) = \sum_i \alpha_i v_i.$$

Ainsi, tout sous-espace contenant les f_i et $H_0^2(]0, 1[)$ doit contenir tout $D(A_V)$, ce qui implique $A_V \subset A$ et finalement $A = A_V$. Par ailleurs, la formule (2.18) montre bien (2.17).

Il reste à étudier l'auto-adjonction de A_V . On a $(g, h) \in G(A_V^*) \subset L^2(]0, 1[)^2$ si et seulement si

$$-\int_0^1 \overline{g(t)} f''(t) dt = \int_0^1 \overline{h(t)} f(t) dt$$

pour tout $f \in D_V$. En prenant d'abord $f \in C_c^\infty(]0, 1[)$, qui est inclus dans tous les D_V , on obtient que $-g'' = h$ au sens des distributions. Comme $g, h \in L^2(]0, 1[)$ par hypothèse, on peut conclure, en utilisant le lemme de régularité elliptique (lemme A.3 dans l'appendice A) que $g' \in L^\infty(]0, 1[) \subset L^2(]0, 1[)$ et donc que $g \in H^2(]0, 1[)$. Ceci est juste la traduction du fait que $A_V^* \subset (A_0)^* = A^{\max}$. Une fois cette information obtenue, on peut utiliser une intégration par parties qui fournit

$$\overline{g'(1)}f(1) - \overline{g(1)}f'(1) + \overline{g(0)}f'(0) - \overline{g'(0)}f(0) = 0$$

ou, de façon équivalente,

$$\left\langle \begin{pmatrix} g(0) \\ g'(0) \\ g(1) \\ g'(1) \end{pmatrix}, M \begin{pmatrix} f(0) \\ f'(0) \\ f(1) \\ f'(1) \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{C}^4} = 0.$$

Comme cette relation est valable pour tout $f \in D(A_V)$ et que, par ailleurs, le vecteur $(f(0), f'(0), f(1), f'(1))$ décrit tout le sous-espace isotrope V par la surjectivité de la restriction au bord (2.12), on en déduit que nécessairement

$$(g(0), g'(0), g(1), g'(1)) \in (MV)^\perp.$$

De telles fonctions étant évidemment dans $D(A_V^*)$, on conclut que

$$D(A_V^*) = \{g : g \in H^2(]0, 1[), (g(0), g'(0), g(1), g'(1)) \in (MV)^\perp\}.$$

Dit autrement,

$$A_V^* = A_{(MV)^\perp}$$

(on utilise ici la notation (2.16) pour l'espace $(MV)^\perp$ qui n'est pas forcément un espace isotrope de la matrice M). On a toujours $V \subset (MV)^\perp$, avec égalité si et seulement si $V = (MV)^\perp$ ce qui, puisque M est inversible, est équivalent à $\dim(V) = 2$. Ainsi $A_V = A_V^*$ si et seulement si $\dim V = 2$.

Il reste à démontrer que le spectre de A_V est tout le plan complexe lorsque V est de dimension 0 ou 1. Nous avons déjà vu le cas de A_0 à l'exemple 2.31. Le cas où V est de dimension 1 est exactement similaire, sauf qu'on ne peut pas tester contre n'importe quelle fonction g puisque une condition au bord doit être respectée ($(MV)^\perp$ est dans ce cas de dimension 3). Il faut alors utiliser $g(t) = \alpha e^{it\bar{a}} + \beta e^{-it\bar{a}}$ avec des constantes α, β bien choisies. Nous laissons la preuve en exercice. \square

Exercice 2.47. *Écrire la preuve que $\sigma(A_V) = \mathbb{C}$ lorsque V est de dimension 1.*

Exercice 2.48. *Montrer que pour les Laplaciens de Dirichlet, de Neumann et périodique, on a*

$$\langle f, A_V f \rangle_{L^2(\Omega)} = \int_0^1 |f'(t)|^2 dt$$

pour tout $f \in D(A_V)$. En déduire du Corollaire 2.41 que $\sigma(-\Delta_V) \subset [0, +\infty[$. Que dire du Laplacien de Robin ?

Exercices complémentaires

Exercice 2.49 (Espace $H_{\text{per}}^1(]0, 1[)$ et séries de Fourier). *On note*

$$H_{\text{per}}^1(]0, 1[) := \{f \in H^1(]0, 1[) : f(1) = f(0)\}$$

qui est un sous-espace fermé de $H^1(]0, 1[)$.

1. On appelle $c_k(f) = \int_0^1 f(t)e^{-ikt} dt = \langle e_k, f \rangle$ les coefficients de Fourier de f . Montrer en intégrant par parties que pour tout $f \in H_{\text{per}}^1(]0, 1[)$, on a $c_k(f') = ikc_k(f)$. En déduire que $\sum_{k \in 2\pi\mathbb{Z}} |k|^2 |c_k(f)|^2 < \infty$.
2. Soit $f \in L^2(]0, 1[)$ une fonction telle que $\sum_{k \in 2\pi\mathbb{Z}} |k|^2 |c_k(f)|^2 < \infty$. Montrer que la série de Fourier

$$\sum_{k \in 2\pi\mathbb{Z}} c_k(f) e_k(x)$$

converge uniformément sur $[0, 1]$. En déduire que f s'identifie à une fonction continue, telle que $f(0) = f(1)$. Calculer aussi $\langle f, \varphi' \rangle$ pour tout $\varphi \in C_c^\infty(]0, 1[)$ et en déduire que $f \in H_{\text{per}}^1(]0, 1[)$.

En conclusion nous avons montré que

$$H_{\text{per}}^1(]0, 1[) = \left\{ f \in L^2(]0, 1[) : \sum_{k \in 2\pi\mathbb{Z}} |k|^2 |c_k(f)|^2 < \infty \right\}.$$

3. Montrer que pour tout $\lambda \in \mathbb{R} \setminus 2\pi\mathbb{Z}$, l'opérateur $(P_{\text{per}} - \lambda)^{-1}$ introduit en (2.14) est bien défini de $L^2(]0, 1[)$ dans $H_{\text{per}}^1(]0, 1[)$ et qu'il est borné. Montrer pour finir que c'est bien l'inverse de $P_{\text{per}} - \lambda$ sur $H_{\text{per}}^1(]0, 1[)$.
4. Étendre les résultats à $H_{\text{per}, \theta}^1(]0, 1[)$ et conclure la preuve du théorème 2.44.

Exercice 2.50 (Attention aux commutateurs). *La théorie des opérateurs en dimension infinie est plus délicate qu'elle n'y paraît et peut parfois aller contre l'intuition. L'excellent article [Gie00], écrit à destination des physiciens, fournit plusieurs exemples d'apparentes contradictions qui découlent d'une mauvaise utilisation de cette théorie. En voici l'un d'eux.*

On se place sur le cercle unité ou, de façon équivalente, sur $]0, 1[$ avec les conditions périodiques au bord vues dans cette section. On regarde les opérateurs $X : f(x) \mapsto xf(x)$ et $P_{\text{per}} = -i(d/dx)$, définis sur leurs domaines respectifs $D(X) = L^2(]0, 1[)$ (c'est un opérateur borné!) et

$$H_{\text{per}}^1(]0, 1[) = \{f \in H^1(]0, 1[) : f(0) = f(1)\}$$

sur lesquels nous avons vu qu'ils étaient tous les deux auto-adjoints. On a

$$[P_{\text{per}}, X]f = (P_{\text{per}}X - XP_{\text{per}})f = -i((xf)' - xf') = -if$$

qui est la relation d'Heisenberg $[P_{\text{per}}, X] = -i$. Les fonctions $e_k(x) = e^{ikx}$ pour $k \in 2\pi\mathbb{Z}$ sont les vecteurs propres normalisés de P_{per} , avec $P_{\text{per}}e_k = ke_k$. En utilisant l'auto-adjonction de P_{per} , on trouve :

$$\begin{aligned} -i &= \langle e_k, -ie_k \rangle = \langle e_k, [P_{\text{per}}, X]e_k \rangle = \langle P_{\text{per}}e_k, Xe_k \rangle - \langle Xe_k, P_{\text{per}}e_k \rangle \\ &= (k - k) \int_0^1 x|e_k(x)|^2 dx = 0. \end{aligned}$$

Où est l'erreur ?

Exercice 2.51 (Indices de défaut). Soit A un opérateur symétrique fermé.

1. Montrer que $\|(A + i)v\| = \|(A - i)v\|$ pour tout $v \in D(A)$. En déduire que l'opérateur $U = (A + i)(A - i)^{-1}$ est une isométrie (partielle) de $\text{Im}(A - i)$ dans $\text{Im}(A + i)$.
2. Que peut-on en conclure en dimension finie ?
3. Soit $B = B^*$ une extension auto-adjointe de A . Montrer que $V = (B + i)(B - i)^{-1}$ est une isométrie de \mathfrak{H} dans \mathfrak{H} , qui est une extension de U , c'est-à-dire telle que $Vf = Uf$ pour tout $f \in D(A)$.
4. Montrer alors que l'image de $\text{Im}(A + i)^\perp = \ker(A^* - i)$ par V contient $\text{Im}(A - i)^\perp = \ker(A^* + i)$.
5. En déduire qu'un opérateur symétrique ne peut posséder des extensions auto-adjointes que si $\dim \ker(A^* - i) = \dim \ker(A^* + i)$ (qui peut être finie ou infinie).
6. Réinterpréter le résultat de l'exercice 2.30 dans cette perspective.

Exercice 2.52 (Laplacien périodique et de Born-von Karman). À la section 2.8.1, nous avons défini l'opérateur d'impulsion périodique P_{per} sur $H_{\text{per}}^1(]0, 1[)$ et sa généralisation aux conditions de Born-von Karman sur $H_{\text{per}, \theta}^1(]0, 1[)$. Ensuite, à la section 2.8.2 nous avons traité le cas du Laplacien sur le même intervalle $]0, 1[$. L'étude se généralise à toute dimension.

Soit $\Omega =]0, 1[^d$ le cube unité de \mathbb{R}^d . Les conditions périodiques sont juste celles qui sont obtenues lorsqu'on restreint une fonction \mathbb{Z}^d -périodique $f \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^d)$ à la cellule unité Ω . Les fonctions périodiques sur \mathbb{R}^d satisfont par définition la relation

$$f(x + \ell) = f(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \forall \ell \in \mathbb{Z}^d,$$

ce qui implique en particulier que

$$\nabla f(x + \ell) = \nabla f(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \forall \ell \in \mathbb{Z}^d.$$

La seule façon pour que x et $x + \ell$ soient tous les deux dans $\overline{\Omega}$ est qu'ils soient tous les deux sur le bord, sur deux faces opposées. Ainsi, nous sommes amenés à étudier le Laplacien défini sur le domaine

$$\begin{aligned} D(-\Delta_{\text{per}}) &= H_{\text{per}}^2(\Omega) := \left\{ f \in H^2(\Omega) : f(x + \ell) = f(x) \text{ et} \right. \\ &\quad \left. (\partial_n f)(x + \ell) = -(\partial_n f)(x), \forall (x, \ell) \in \partial\Omega \times \mathbb{Z}^d \text{ avec } x + \ell \in \partial\Omega \right\}, \quad (2.19) \end{aligned}$$

que nous notons $-\Delta_{\text{per}}$. Le signe moins dans la condition sur les dérivées normales vient de l'orientation du vecteur normal au bord, qui est toujours sortant par définition. Dans l'Appendice A nous rappelons la définition de la trace d'une fonction $f \in H^2(\Omega)$ et de sa dérivée normale sur le bord. Ici Ω est l'intérieur un polyèdre et il n'est donc pas lisse. Cependant $\partial\Omega$ est l'union de faces qui sont plates (donc lisses), et la restriction à chacune de ces faces F_i est donc bien définie, avec $f|_{F_i} \in H^{3/2}(F_i)$ et $\partial_n f|_{F_i} \in H^{1/2}(F_i)$. Il y a également des conditions de compatibilité supplémentaires sur les arêtes mais nous n'en avons pas besoin pour définir correctement le domaine (2.19), puisque la condition ne fait intervenir que les faces opposées. Dans tous les cas, la continuité de l'application de trace sur le bord implique que $D(-\Delta_{\text{per}}) = H^2_{\text{per}}(\Omega)$ est un sous-espace fermé de $H^2(\Omega)$ (mais pas de $L^2(\Omega)$).

1. Pour $f \in D(-\Delta_{\text{per}})$, calculer les coefficients de Fourier de Δf . Donner une caractérisation de $D(-\Delta_{\text{per}}) = H^2_{\text{per}}(\Omega)$ à l'aide des séries de Fourier.
2. Montrer que l'opérateur $-\Delta_{\text{per}}$ est auto-adjoint sur $D(-\Delta_{\text{per}})$ et que son spectre est

$$\sigma(-\Delta_{\text{per}}) = \left\{ |k|^2, k \in 2\pi\mathbb{Z}^d \right\},$$

avec les fonctions propres $(e^{ik \cdot x})_{k \in 2\pi\mathbb{Z}^d}$.

3. Généraliser ce qui précède à la condition de Born-von Karman

$$f(x + \ell) = f(x)e^{i\xi \cdot \ell}, \quad \xi \in (0, 2\pi)^d.$$

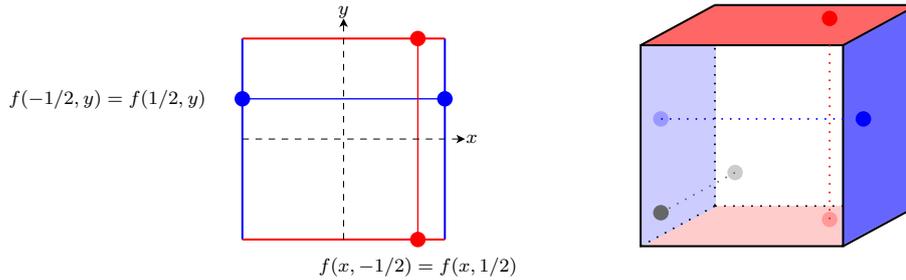


FIGURE 2.1 – Conditions périodiques en dimensions 2 et 3.

Chapitre 3

Critères d'auto-adjonction : Rellich, Kato & Friedrichs

L'objectif de ce chapitre est de fournir des critères pratiques pour construire des extensions auto-adjointes d'opérateurs symétriques.

Une première approche naturelle est de déterminer sous quelle condition sur B un opérateur sous la forme $A + B$ est auto-adjoint lorsque A est lui-même un opérateur auto-adjoint connu. Dans la première section nous présenterons une condition, due à Rellich et Kato, qui garantit que $A + B$ est auto-adjoint sur le même domaine que A :

$$D(A + B) = D(A).$$

Ensuite, nous discuterons d'une méthode due à Friedrichs mais basée sur des théorèmes de Riesz et de Lax-Milgram, qui permet de définir des opérateurs de façon un peu indirecte, en utilisant leur forme quadratique. Cette dernière méthode est si efficace qu'il est maintenant devenu classique [Bre94, Eva10, Alo18] de développer la théorie des équations aux dérivées partielles elliptiques en se basant presque uniquement sur la forme quadratique, sans jamais parler d'auto-adjonction de l'opérateur associé ! Nous ferons ici le lien formel entre la question de l'auto-adjonction et les méthodes basées sur les formes quadratiques, comme le théorème de Lax-Milgram. Ceci permettra ensuite de construire des réalisations auto-adjointes d'opérateurs sous la forme $A + B$, en garantissant seulement l'égalité des domaines des formes quadratiques associées

$$Q(A + B) = Q(A)$$

sans que les domaines des opérateurs soient eux nécessairement égaux.

Finalement, nous appliquerons ces techniques aux opérateurs de Schrödinger, c'est-à-dire sous la forme $A = -\Delta + V(x)$. La fonction V peut tendre vers 0 à l'infini en décrivant ainsi une particule quantique qui n'est confinée que localement, ou alors tendre vers $+\infty$ quand $|x| \rightarrow +\infty$, ce qui correspond à une particule vraiment confinée, comme c'est le cas pour l'oscillateur harmonique.

3.1 Perturbations relativement bornées

Dans cette section nous donnons un critère sur un opérateur symétrique B qui implique que $A + B$ est auto-adjoint sur le même domaine $D(A)$ que l'opérateur auto-adjoint A , puis nous l'appliquons au cas où $A = -\Delta$ et $B = V(x)$ est l'opérateur de multiplication par une fonction.

3.1.1 Théorie de Rellich-Kato

Le résultat suivant est essentiellement dû à Rellich [Rel37], mais il a été popularisé et abondamment utilisé par Kato pour les opérateurs de Schrödinger [Kat51].

Théorème 3.1 (Rellich-Kato). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A)$ et B un opérateur symétrique sur le même domaine $D(A)$. S'il existe $0 \leq \alpha < 1$ et $C > 0$ tels que*

$$\|Bv\| \leq \alpha \|Av\| + C\|v\|, \quad \forall v \in D(A), \quad (3.1)$$

alors l'opérateur $A + B$ est auto-adjoint sur $D(A)$. De plus, si $\mathcal{D} \subset D(A)$ est un sous-espace dense tel que $\overline{A|_{\mathcal{D}}} = A$, alors $A + B$ est essentiellement auto-adjoint sur \mathcal{D} , de fermeture définie sur $D(A)$.

Démonstration. Comme $A + B$ est par hypothèse symétrique sur $D(A)$, il suffit de montrer que $A + B \pm i\mu$ est surjectif de $D(A)$ dans \mathfrak{H} pour un $\mu \in \mathbb{R}$ bien choisi, d'après le théorème 2.36. On écrit alors

$$A + B + i\mu = \left(1 + B(A + i\mu)^{-1}\right)(A + i\mu).$$

Comme l'opérateur $A + i\mu$ est inversible de $D(A)$ dans \mathfrak{H} pour tout $\mu \in \mathbb{R}$, puisque A est auto-adjoint, il suffit de prouver que $1 + B(A + i\mu)^{-1}$ est inversible sur \mathfrak{H} . Comme nous l'avons rappelé dans la preuve du lemme 2.8, il suffit pour cela de trouver μ tel que

$$\|B(A + i\mu)^{-1}\| < 1.$$

En appliquant l'inégalité (3.1), on déduit que

$$\|B(A + i\mu)^{-1}v\| \leq \alpha \|A(A + i\mu)^{-1}v\| + C\|(A + i\mu)^{-1}v\|,$$

ce fournit l'inégalité sur les normes d'opérateurs

$$\|B(A + i\mu)^{-1}\| \leq \alpha \|A(A + i\mu)^{-1}\| + C\|(A + i\mu)^{-1}\|.$$

Rappelons la relation fondamentale vue en (2.8)

$$\|(A + i\mu)v\|^2 = \|Av\|^2 + \mu^2 \|v\|^2, \quad \forall v \in D(A),$$

ce qui implique

$$\|v\|^2 = \|A(A + i\mu)^{-1}v\|^2 + \mu^2 \|(A + i\mu)^{-1}v\|^2, \quad \forall v \in \mathfrak{H},$$

et donc

$$\|A(A + i\mu)^{-1}\| \leq 1, \quad \|(A + i\mu)^{-1}\| \leq \frac{1}{|\mu|}.$$

Pour conclure, nous avons

$$\|B(A + i\mu)^{-1}\| \leq \alpha + \frac{C}{|\mu|}$$

qui est bien strictement inférieur à 1 pour μ assez grand.

Si \mathcal{D} est un cœur de A , c'est-à-dire un sous-espace dense sur lequel A est essentiellement auto-adjoint (ou encore qui est dense dans $D(A)$ pour la norme du graphe), alors $(A + B)|_{\mathcal{D}}$ est également symétrique. Par ailleurs, si $v_n \rightarrow v$ et $Av_n \rightarrow Av$ avec $v_n \in \mathcal{D}$, nous avons $Bv_n \rightarrow Bv$ par (3.1). Ceci montre que $(A + B)v_n \rightarrow (A + B)v$, c'est-à-dire que $A + B$ est la fermeture de $(A + B)|_{\mathcal{D}}$. \square

Remarque 3.2. *Si A a son spectre minoré, alors sous les hypothèses du théorème 3.1, $A + B$ aura aussi un spectre minoré. L'argument est exactement le même que dans la preuve précédente, en remplaçant $i\mu$ par $\mu \in \mathbb{R}$ très grand. On doit utiliser le fait que si A a un spectre minoré, alors*

$$\|A(A + \mu)^{-1}\| \leq 1 + \frac{C}{\mu}, \quad \|(A + \mu)^{-1}\| \leq \frac{C}{\mu}, \quad (3.2)$$

pour μ assez grand, ce qui suit du théorème spectral que nous verrons au chapitre 4.

Définition 3.3 (Opérateurs relativement bornés). *Soit $\alpha \in]0, \infty[$ et A un opérateur auto-adjoint. Lorsqu'un opérateur B symétrique sur $D(A)$ satisfait (3.1), on dit qu'il est A -borné, de borne relative α . S'il vérifie de plus (3.1) pour tout $\alpha > 0$, on dit qu'il est infinitésimalement A -borné.*

Dans la preuve du théorème nous avons montré que $\|B(A + i\mu)^{-1}\| < 1$ pour μ assez grand. Il se trouve que ceci est en fait équivalent à l'hypothèse (3.1).

Exercice 3.4. *Soit A un opérateur auto-adjoint et B un opérateur symétrique sur $D(A)$. Montrer que B est A -borné de borne relative < 1 si et seulement si $B(A + i\mu)^{-1}$ est un opérateur borné, avec*

$$\limsup_{|\mu| \rightarrow +\infty} \|B(A + i\mu)^{-1}\| < 1.$$

Montrer qu'il est infinitésimalement A -borné si et seulement si

$$\lim_{|\mu| \rightarrow +\infty} \|B(A + i\mu)^{-1}\| = 0.$$

3.1.2 Application aux opérateurs de Schrödinger

Nous voulons appliquer la technique de Rellich-Kato pour étudier les opérateurs sous la forme $-\Delta + V(x)$ dans $H^2(\mathbb{R}^d)$. Il faut pouvoir contrôler $\|Vf\|$ par $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui est l'objet du théorème suivant.

Théorème 3.5 (Potentiels infinitésimalement $(-\Delta)$ -bornés). *Soit*

$$V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$$

avec

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5. \end{cases} \quad (3.3)$$

Alors, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe une constante C_ε telle que

$$\|Vf\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \varepsilon \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}, \quad \forall f \in H^2(\mathbb{R}^d). \quad (3.4)$$

et

$$\left| \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|f(x)|^2 dx \right| \leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2 dx + C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 dx, \quad \forall f \in H^1(\mathbb{R}^d). \quad (3.5)$$

Remarquons que les conditions (3.3) sont légèrement plus fortes (en dimension $d \leq 4$) que celles rencontrées en (1.31) au chapitre 1, qui servaient seulement à assurer (3.5).

Remarque 3.6. *Comme à la remarque 1.16, si on a $V \in L^q(\mathbb{R}^d)$ avec $q > \max(2, d/2)$ en dimension $d \neq 4$, alors $V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$ où p vérifie (3.3).*

Démonstration. La preuve est exactement la même que celle du lemme 1.14, sauf qu'on doit estimer $\int_{\mathbb{R}^d} V^2|f|^2$ par la norme $H^2(\mathbb{R}^d)$ de f , et il faut donc utiliser l'injection de Sobolev correspondante, rappelée à l'appendice A au théorème A.13. \square

Exercice 3.7. *Écrire la preuve du théorème 3.5.*

Le résultat suivant est une simple conséquence du théorème précédent et du théorème 3.1 de Rellich-Kato.

Corollaire 3.8 (Auto-adjonction des opérateurs de Schrödinger). *Soit*

$$V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$$

une fonction à valeurs réelles, avec

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5. \end{cases}$$

Alors l'opérateur $f \mapsto -\Delta f + Vf$ est auto-adjoint sur $D(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^d)$ et son spectre est minoré.

Par ailleurs, $f \mapsto -\Delta f + Vf$ est essentiellement auto-adjoint sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ ou tout autre sous-espace dense dans $H^2(\mathbb{R}^d)$.

Démonstration. Comme la fonction V est réelle, $f \mapsto Vf$ est symétrique. Par ailleurs cet opérateur est bien défini sur $H^2(\mathbb{R}^d)$ et il est infinitésimalement $(-\Delta)$ -borné, d'après (3.4). Le résultat suit alors du théorème 3.1 de Rellich-Kato. Pour la minoration du spectre, on utilise le corollaire 2.41 et l'inégalité

$$\begin{aligned} \langle f, (-\Delta + V)f \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} &= \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|f(x)|^2 dx \\ &\geq (1 - \varepsilon) \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2 dx - C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 dx \\ &\geq -C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 dx, \end{aligned}$$

d'après (3.5). □

Le théorème signifie que perturber le Laplacien par une fonction qui reste bornée à l'infini dans un sens faible (plus précisément une fonction qui s'écrit $V = V_1 + V_2$ avec $V_1 \in L^p(\mathbb{R}^d)$ et $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$) ne change pas le domaine d'auto-adjonction. Les opérateurs sous la forme $A = -\Delta + V$ s'appellent *opérateurs de Schrödinger*.

Exemple 3.9 (Atome d'hydrogène). *L'atome d'hydrogène étudié au chapitre 1 est décrit par le potentiel $V(x) = -|x|^{-1}$ en dimension $d = 3$. Comme $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, on conclut que*

l'opérateur $-\Delta - |x|^{-1}$ est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^3)$.

Voici un autre exemple d'utilisation de la technique de Rellich-Kato.

Exemple 3.10 (Champ magnétique). *Soit $A : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ un champ de vecteur tel que $A \in L^4(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ et $\operatorname{div} A \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, où $\operatorname{div} A$ est compris au sens des distributions. On désire définir l'opérateur*

$$H_A = (P + A)^2 = \sum_{j=1}^3 (-i\partial_{x_j} + A_j(x))^2.$$

Si $f \in H^2(\mathbb{R}^3)$, alors $f \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\mathbb{R}^3)$ par les injections de Sobolev, de sorte que par exemple $Af \in L^4(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ et on peut calculer, au sens des distributions,

$$\begin{aligned} H_A f &= -\Delta f + |A|^2 f - i \sum_{j=1}^3 (\partial_{x_j} A_j f + A_j \partial_{x_j} f) \\ &= -\Delta f + |A|^2 f - i \operatorname{div}(A) f - 2i \sum_{j=1}^3 A_j \partial_{x_j} f. \end{aligned}$$

Pour justifier le passage de la première à la seconde ligne, on peut d'abord prendre $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ et conclure par densité dans $H^2(\mathbb{R}^3)$. La fonction $|A|^2 f$ appartient à $L^2(\mathbb{R}^3)$, avec l'estimée

$$\| |A|^2 f \|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \varepsilon \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}$$

d'après le théorème 3.5 appliqué à $V = |A|^2$. De façon similaire, on a

$$\|\operatorname{div}(A) f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \varepsilon \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}$$

et, en écrivant $A = A' + A'' \in L^4(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$,

$$\|A_j \partial_{x_j} f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \|A'_j\|_{L^4(\mathbb{R}^3)} \|\partial_{x_j} f\|_{L^4(\mathbb{R}^3)} + \|A''_j\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \|\partial_{x_j} f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

Par ailleurs, on a par l'injection de Sobolev

$$\|\partial_{x_j} f\|_{L^4(\mathbb{R}^3)} \leq \|\partial_{x_j} f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^{1/4} \|\partial_{x_j} f\|_{L^6(\mathbb{R}^3)}^{3/4} \leq C \|\partial_{x_j} f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^{1/4} \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^{3/4}$$

et, par Cauchy-Schwarz,

$$\|\partial_{x_j} f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |k_j|^2 |\widehat{f}(k)|^2 dk \leq \int_{\mathbb{R}^3} |k|^2 |\widehat{f}(k)|^2 dk \leq \|f\|_{L^2} \|\Delta f\|_{L^2},$$

ce qui montre finalement que

$$\|A_j \partial_{x_j} f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^{1/8} \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^{7/8} \leq \varepsilon \|\Delta f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \frac{C}{\varepsilon^7} \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

Comme l'opérateur H_A est symétrique sur $H^2(\mathbb{R}^3)$ (le vérifier en écrivant l'intégration par parties) et que $|A|^2 - 2i \sum_{j=1}^3 A_j \partial_{x_j} - i \operatorname{div} A$ est une perturbation infinitésimalement bornée de $-\Delta$, on conclut que H_A est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^3)$.

3.2 Formes quadratiques et auto-adjonction

Dans cette section nous présentons une technique complètement différente pour trouver des extensions auto-adjointes d'opérateurs, qui est adaptée au cas particulier où la forme quadratique associée à l'opérateur est minorée.

3.2.1 Définition et fermeture

Soit A un opérateur symétrique sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. On appelle *forme quadratique associée* à A celle définie par

$$q_A(v) := \langle v, Av \rangle, \quad v \in D(A).$$

On peut aussi regarder la forme polaire associée, qui vaut

$$\varphi_A(v, w) := \langle v, Aw \rangle, \quad v, w \in D(A)$$

et peut être retrouvée à partir de q_A à l'aide de la *formule de polarisation*

$$\varphi_A(v, w) = \frac{1}{4} \left(q_A(v+w) - q_A(v-w) + iq_A(v+iw) - iq_A(v-iw) \right).$$

Définition 3.11 (Borné inférieurement, coercif). *On dit qu'un opérateur symétrique $(A, D(A))$ est borné inférieurement ou minoré lorsqu'il existe $\alpha \in \mathbb{R}$ tel que*

$$\boxed{\langle v, Av \rangle \geq \alpha \|v\|^2, \quad \forall v \in D(A).} \quad (3.6)$$

Dans ce cas on note

$$\boxed{A \geq \alpha.}$$

On dit qu'il est coercif lorsque (3.6) est vérifiée avec un $\alpha > 0$.

Lorsque A est auto-adjoint, le corollaire 4.9 du chapitre suivant montrera que l'hypothèse (3.6) est équivalente à dire que $\sigma(A) \subset [\alpha, \infty[$. Mais nous supposons pour l'instant seulement que A est symétrique.

Dans cette section, nous supposons toujours que A est un opérateur borné inférieurement, et aurons fréquemment besoin qu'il soit de plus coercif. Bien sûr, si A est borné inférieurement par α sans être coercif, alors $A+a$ est coercif pour $a > -\alpha$, et tous les résultats énoncés avec A coercif s'étendent aisément au cas d'un opérateur borné inférieurement en remplaçant A par $A+a$.

Lorsque A est coercif, nous voyons que $v \in D(A) \mapsto \sqrt{q_A(v)}$ définit une norme, et que φ_A définit un produit scalaire sur $D(A)$, tels que

$$q_A(v) \geq \alpha \|v\|^2.$$

En général, l'espace $D(A)$ n'est pas complet pour cette norme et il semble naturel de chercher à le compléter.

Lorsqu'on dispose d'une structure pré-hilbertienne sur un sous-espace \mathcal{D} de \mathfrak{H} , le complété abstrait \mathcal{Q} n'est pas nécessairement identifiable à un sous-espace de \mathfrak{H} . Il peut être beaucoup plus gros. Voici un exemple similaire à l'exercice 2.18 du chapitre 2.

Exemple 3.12 (Complétion de δ). *Considérons la forme quadratique $q : u \in C_c^\infty(]0, 1[) \mapsto \int_0^1 |u|^2 + |u(1/2)|^2$ qui est associée à l'opérateur de l'exercice 2.18, dans l'espace de Hilbert $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1[)$ et vérifie (3.6). Nous pouvons identifier $C_c^\infty(]0, 1[)$ au sous-espace $\{(u, u(1/2)), u \in C_c^\infty(]0, 1[)\}$ de l'espace de Hilbert élargi $\mathfrak{H}' = L^2(]0, 1[) \times \mathbb{C}$, sur lequel la forme quadratique est une restriction de*

$$q'(u, \lambda) := \int_0^1 |u(x)|^2 dx + |\lambda|^2.$$

Le procédé de complétion fournit justement la forme q' sur tout l'espace de Hilbert \mathfrak{H}' car la valeur $u_n(1/2)$ peut converger vers n'importe quel complexe $\lambda \in \mathbb{C}$ lorsque $u_n \rightarrow u$ dans $L^2(]0, 1[)$. Par ce procédé, l'espace \mathfrak{H}' ne s'identifie pas à un sous-espace de $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1[)$.

La définition suivante est une adaptation des concepts vus au chapitre 2 au cas des formes quadratiques.

Définition 3.13 (Formes quadratiques). *Soit φ un produit scalaire défini sur un sous-espace \mathcal{Q} dense dans \mathfrak{H} , de forme quadratique associée $q(v) = \varphi(v, v)$. On dit que q est coercive lorsqu'il existe une constante $\alpha > 0$ telle que*

$$q(v) \geq \alpha \|v\|^2, \quad \forall v \in \mathcal{Q}.$$

On dit que q est fermée lorsqu'elle est coercive et (\mathcal{Q}, φ) est un espace de Hilbert, c'est-à-dire est complet : pour toute suite (v_n) telle que

$$\lim_{n, m \rightarrow \infty} q(v_n - v_m) = 0,$$

il existe $v \in \mathcal{Q}$ tel que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} q(v_n - v) = 0.$$

On dit que q est fermable dans \mathfrak{H} lorsqu'elle admet une extension dans \mathfrak{H} , qui est fermée. Dans ce cas, le complété $(\overline{\mathcal{Q}}, \overline{\varphi})$ de (\mathcal{Q}, φ) s'identifie à un sous-espace dense de \mathfrak{H} .

De la même façon que tout opérateur symétrique est fermable, nous pouvons montrer que tout opérateur symétrique coercif a une forme quadratique qui est fermable.

Théorème 3.14 (Forme quadratique d'un opérateur symétrique). *Soit $A \geq \alpha > 0$ un opérateur symétrique coercif sur son domaine $D(A)$. Alors sa forme quadratique q_A est toujours fermable. Sa fermeture, notée \overline{q}_A et de forme polaire associée $\overline{\varphi}_A$, est définie sur $\mathcal{Q}_A \subset \mathfrak{H}$, qui est complet pour $\overline{\varphi}_A$. De plus on a les propriétés suivantes :*

- $D(A)$ est dense dans \mathcal{Q}_A pour la norme associée à \overline{q}_A ;
- \mathcal{Q}_A est dense dans \mathfrak{H} pour la norme de \mathfrak{H} ;

- pour tout $u \in D(A)$ et tout $v \in \mathcal{Q}_A$ on a

$$\overline{\varphi}_A(v, u) = \langle v, Au \rangle ;$$

- l'injection $\mathcal{Q}_A \hookrightarrow \mathfrak{H}$ est continue, c'est-à-dire

$$\alpha \|v\|^2 \leq \overline{q}_A(v)$$

pour tout $v \in \mathcal{Q}_A$;

- si A est fermé, l'injection $D(A) \hookrightarrow \mathcal{Q}_A$ est également continue, c'est-à-dire

$$\overline{q}_A(v) = \langle v, Av \rangle \leq \frac{1}{2} \|v\|_{D(A)}^2 = \frac{\|v\|^2}{2} + \frac{\|Av\|^2}{2}$$

pour tout $v \in D(A)$.

Si A est borné inférieurement sans être coercif, c'est-à-dire vérifie $\langle v, Av \rangle \geq \alpha \|v\|^2$ pour tout $v \in D(A)$, nous posons de façon similaire $q_A := q_{A+a} - a \|\cdot\|^2$ pour $a > -\alpha$. On vérifie que cette définition est indépendante de a .

Démonstration. Plutôt que de montrer que la complétion abstraite de q_A sur $D(A)$ s'identifie bien à un sous-espace de \mathfrak{H} , nous la construisons de façon plus concrète. Soit $(v_n) \subset D(A)$ une suite de Cauchy pour q_A , c'est-à-dire telle que

$$\lim_{n,m \rightarrow \infty} q_A(v_n - v_m) = 0.$$

Alors par (3.6), (v_n) est de Cauchy dans \mathfrak{H} , et converge donc vers $v \in \mathfrak{H}$. Par ailleurs nous avons l'inégalité triangulaire

$$\lim_{n,m \rightarrow \infty} \left| \sqrt{q_A(v_n)} - \sqrt{q_A(v_m)} \right| \leq \lim_{n,m \rightarrow \infty} \sqrt{q_A(v_n - v_m)} = 0$$

(car $v \mapsto \sqrt{q_A(v)}$ est une norme) ce qui montre que $q_A(v_n)$ converge vers un réel positif noté $\overline{q}_A(v)$. Ceci nous amène à poser

$$\mathcal{Q}_A := \left\{ v \in \mathfrak{H} : \exists (v_n) \subset D(A), v_n \rightarrow v, \lim_{n,m \rightarrow \infty} q_A(v_n - v_m) = 0 \right\}$$

et

$$\overline{q}_A(v) = \lim_{n \rightarrow \infty} q_A(v_n).$$

Il faut vérifier que ceci définit \overline{q}_A de façon univoque, c'est-à-dire que $\overline{q}_A(v)$ ne dépend pas de la suite (v_n) choisie. Soit donc (v'_n) une autre suite de Cauchy pour q_A qui converge vers v dans \mathfrak{H} . Alors $v_n - v'_n$ est aussi de Cauchy pour q_A et converge vers 0 dans \mathfrak{H} . Ainsi, il suffit de montrer que $q_A(w_n) \rightarrow 0$ pour toute suite $w_n \rightarrow 0$ qui est de Cauchy pour q_A , ce qui est l'équivalent de la propriété (ii) du lemme 2.3. C'est à ce moment seulement

qu'intervient l'hypothèse que q_A provient d'un opérateur symétrique. En effet, nous pouvons écrire

$$q_A(w_n - w_m) = q_A(w_n) + q_A(w_m) - 2\Re\langle w_n, Aw_m \rangle$$

de sorte que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} q_A(w_n) = \lim_{n, m \rightarrow \infty} \Re\langle w_n, Aw_m \rangle = \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \Re\langle w_n, Aw_m \rangle = 0$$

car $w_n \rightarrow 0$ dans \mathfrak{H} . Ceci termine la preuve que $\overline{q_A}$ est bien définie. Nous laissons la vérification des autres propriétés en exercice. \square

Exemple 3.15 (Laplacien sur \mathbb{R}^d). *Considérons l'opérateur $A = -\Delta$ qui est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$, comme nous l'avons vu au corollaire 2.42. Alors on a*

$$q_A(f) = - \int_{\mathbb{R}^d} \overline{f(x)} \Delta f(x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2 dx, \quad \forall f \in H^2(\mathbb{R}^d).$$

Comme q_A est seulement positive, on peut regarder par exemple $A + 1$ de sorte que

$$q_{A+1}(f) = \|f\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 \geq \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2$$

est coercive. Nous voyons que le procédé de complétion fournit simplement la forme quadratique

$$\overline{q_A}(f) = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla f(x)|^2 dx \quad \text{sur} \quad \mathcal{Q}_A = H^1(\mathbb{R}^d),$$

puisque $H^2(\mathbb{R}^d)$ est dense dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ pour la norme de $H^1(\mathbb{R}^d)$.

3.2.2 Cas des opérateurs auto-adjoints

Nous verrons que la forme quadratique est un objet qui peut être parfois plus facile à manipuler que l'opérateur A lui-même. Il est cependant légitime de se demander quelle relation il y a entre A et $\overline{q_A}$. Peut-on retrouver A à partir de $\overline{q_A}$? La réponse est négative pour un opérateur symétrique quelconque, mais elle est positive pour un opérateur auto-adjoint, ce qui justifie en partie l'introduction de la notion de forme quadratique.

Théorème 3.16 (Caractérisation du domaine). *Soit A un opérateur auto-adjoint borné inférieurement et soit $\overline{\varphi_A}$ la forme polaire fermée associée, construite au théorème 3.14. Les propositions suivantes sont équivalentes :*

- (i) $v \in \mathcal{Q}_A$ et il existe $z \in \mathfrak{H}$ tel que $\overline{\varphi_A}(v, h) = \langle z, h \rangle$ pour tout $h \in \mathcal{Q}_A$;
- (ii) $v \in D(A)$ et $Av = z$.

Démonstration. Si $v \in D(A)$ et $Av = z$, alors $\overline{\varphi}_A(v, h) = \langle Av, h \rangle = \langle z, h \rangle$ pour tout $h \in \mathcal{Q}_A$.

Réciproquement, si $\overline{\varphi}_A(v, h) = \langle z, h \rangle$ pour tout $h \in \mathcal{Q}_A$, alors on peut prendre $h \in D(A)$ et on trouve $\langle v, Ah \rangle = \langle z, h \rangle$ pour tout $h \in D(A)$. Cela signifie que $(v, z) \in G(A^*) = G(A)$ puisque A est supposé auto-adjoint. Donc $v \in D(A)$ et $Av = z$. \square

Puisqu'un opérateur auto-adjoint est totalement caractérisé par la fermeture \overline{q}_A de sa forme quadratique, nous noterons toujours, pour simplifier,

$$\boxed{q_A := \overline{q}_A, \quad \varphi_A := \overline{\varphi}_A, \quad Q(A) := \mathcal{Q}_A.}$$

Pour un opérateur symétrique nous conserverons les notations q_A et \overline{q}_A .

Nous pouvons maintenant utiliser le résultat précédent pour donner une caractérisation variationnelle de l'équation $(A + a)v = z$, un résultat qui est dû à Lax et Milgram.

Théorème 3.17 (Lax-Milgram). *Soit $A \geq \alpha$ un opérateur auto-adjoint borné inférieurement et soit $a > -\alpha$. Soit $z \in \mathfrak{H}$ quelconque. Alors, le problème de minimisation*

$$\inf_{w \in Q(A)} \left\{ \frac{1}{2} q_A(w) + \frac{a}{2} \|w\|^2 - \Re \langle w, z \rangle \right\}; \quad (3.7)$$

admet pour unique minimiseur $v = (A + a)^{-1}z \in D(A)$. Ce dernier est aussi l'unique $v \in Q(A)$ satisfaisant la relation

$$\varphi_A(v, h) + a \langle v, h \rangle = \langle z, h \rangle \quad (3.8)$$

pour tout $h \in Q(A)$.

Le théorème nous précise comment retrouver A (ou plutôt $(A + a)^{-1}$) à partir de la forme quadratique q_A , puisque le point $v = (A + a)^{-1}z$ est l'unique minimiseur du problème (3.7). L'équation (3.8) s'appelle la *formulation faible* de l'équation $(A + a)v = z$ et elle s'obtient formellement en prenant le produit scalaire avec h . Le caractère "faible" vient du fait qu'on suppose seulement que $v \in Q(A)$.

Démonstration. Nous avons déjà vu au théorème 3.16 que la formulation faible (3.8) alliée à la condition que $v \in Q(A)$ était équivalente au fait que $v \in D(A)$ avec $(A + a)v = z$, c'est-à-dire $v = (A + a)^{-1}z$. On peut alors écrire pour tout $w \in Q(A)$, en complétant le carré,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} q_A(w) + \frac{a}{2} \|w\|^2 - \Re \langle w, z \rangle &= \frac{1}{2} q_A(v) + \frac{a}{2} \|v\|^2 - \Re \langle v, z \rangle \\ &= \frac{1}{2} q_A(w - v) + \frac{a}{2} \|w - v\|^2 \geq \frac{a + \alpha}{2} \|w - v\|^2 \end{aligned} \quad (3.9)$$

qui est positif et s'annule seulement quand $w = v$. \square

Exercice 3.18. *Sans utiliser l'information que $v = (A + a)^{-1}z$, montrer que le problème de minimisation (3.7) admet un minimiseur (prendre une suite minimisante, montrer qu'elle est bornée dans $Q(A)$ et passer à la limite faible dans cet espace). Par un argument de perturbation, montrer que tout minimiseur vérifie la relation (3.8).*

3.2.3 Exemple du Laplacien sur $]0, 1[$

Nous avons vu à la section 2.8.2 de nombreuses réalisations auto-adjointes possibles du Laplacien sur $]0, 1[$. Ces dernières sont paramétrées par tous les espaces isotropes de dimension 2 de la matrice M définie en (2.15). Elles ont toutes une forme quadratique minorée (ce que nous prouverons plus tard au théorème 5.22) que nous déterminons ici dans différents cas particuliers.

Laplacien de Born-von Karman

Pour la condition de Born-von Karman nous avons

$$\begin{aligned} D(A_{\text{per},\theta}) &= H_{\text{per},\theta}^2(]0, 1[) \\ &= \left\{ u \in H^2(]0, 1[) : u(1) = e^{i\theta}u(0), u'(1) = e^{i\theta}u'(0) \right\} \end{aligned}$$

avec $A_{\text{per},\theta}u := -u''$. Une intégration par parties montre que, pour $u \in D(A_{\text{per},\theta})$,

$$q_{A_{\text{per},\theta}}(u) = \int_0^1 |u'(t)|^2 dt.$$

La forme quadratique du Laplacien de Born-von Karman est donc définie sur la fermeture de $D(A_{\text{per},\theta})$ pour la norme $H^1(]0, 1[)$, c'est-à-dire sur le domaine

$$Q(A_{\text{per},\theta}) = H_{\text{per},\theta}^1(]0, 1[) = \left\{ u \in H^1(]0, 1[) : u(1) = e^{i\theta}u(0) \right\}.$$

La condition liant $u'(1)$ et $u'(0)$ est perdue car elle ne fait pas sens dans $H^1(]0, 1[)$.

Laplacien de Robin

Nous discutons maintenant de la condition au bord de Robin, que nous écrivons sous la forme

$$\begin{aligned} D(A_{\text{Rob},\theta}) &= \left\{ u \in H^2(]0, 1[) : \cos(\pi\theta)u(1) + \sin(\pi\theta)u'(1) = 0, \right. \\ &\quad \left. \cos(\pi\theta)u(0) - \sin(\pi\theta)u'(0) = 0 \right\}. \end{aligned}$$

Une intégration par parties fournit, cette fois,

$$\begin{aligned} \langle u, A_{\text{Rob},\theta}u \rangle &= \int_0^1 |u'(t)|^2 dt \\ &+ \begin{cases} \frac{1}{\tan(\pi\theta)} (|u(1)|^2 - |u(0)|^2) & \text{pour } \theta \in]0, 1/2[\cup]1/2, 1[, \\ 0 & \text{pour } \theta \in \{0, 1/2\}. \end{cases} \quad (3.10) \end{aligned}$$

Par l'inégalité

$$\sup_{[0,1]} |u|^2 \leq 2 \|u\|_{L^2(]0,1[)} \|u'\|_{L^2(]0,1[)} + \|u\|_{L^2(]0,1[)}^2, \quad (3.11)$$

démontrée en (A.7) à l'appendice A, la norme associée est encore équivalente à celle de H^1 et la forme quadratique est définie sur le domaine

$$Q(A_{\text{Rob},\theta}) = \begin{cases} H^1(]0,1[) & \text{pour } \theta \in]0,1[, \\ H_0^1(]0,1[) & \text{pour } \theta = 0. \end{cases} \quad (3.12)$$

En effet, les conditions sur $u'(0)$ et $u'(1)$ disparaissent dans $H^1(]0,1[)$. Seule la condition de Dirichlet $u(0) = u(1) = 0$ fait sens dans cet espace. Nous voyons que

- seule la condition au bord de Dirichlet fait sens dans $H^1(]0,1[)$, et la forme quadratique est alors définie sur $Q(A_{\text{Rob},0}) = H_0^1(]0,1[)$;
- les formes quadratiques pour le Laplacien de Robin avec $\theta \in]0,1[$ (incluant donc le cas $\theta = 1/2$ de Neumann) sont toutes définies sur le même domaine $H^1(]0,1[)$, où la condition au bord est invisible;
- la condition au bord de Neumann n'est visible ni dans l'espace de définition $Q(A_{\text{Rob},1/2}) = H^1(]0,1[)$, ni dans l'expression de la forme quadratique associée;
- la forme quadratique associée à $A_{\text{Rob},\theta}$ dépend de θ et contient un terme de bord seulement pour $\theta \in]0,1[\setminus \{1/2\}$.

Ces résultats font jouer des rôles particuliers aux Laplaciens de Dirichlet et de Neumann, alors que du point de vue des opérateurs auto-adjoints $A_{\text{Rob},\theta}$, il n'y a pas de différence flagrante dans les domaines de définitions $D(A_{\text{Rob},\theta})$, qui se déduisent les uns des autres en faisant varier θ continûment. Cette discussion montre comment, d'une certaine manière, la théorie spectrale des opérateurs est parfois plus naturelle que celle des formes quadratiques associées.

Remarque 3.19. *Lorsque $\theta \rightarrow 0^+$ le terme de bord en $1/\tan(\pi\theta)$ tend vers $+\infty$ et il joue alors le rôle d'une pénalisation qui mène, à la limite, à la condition de Dirichlet $u(0) = u(1) = 0$. Nous étudierons le comportement des valeurs propres du Laplacien de Robin plus tard à l'exercice 5.56.*

3.2.4 Réalisation de Friedrichs

Nous avons prouvé que, pour un opérateur auto-adjoint minoré, la donnée de la forme quadratique q_A et de son domaine $Q(A)$ est équivalente à celle de A et $D(A)$. En pratique, une version réciproque du théorème 3.17 due à Friedrichs est souvent utilisée. Elle stipule que toute forme quadratique fermée q est égale à un q_A pour un opérateur auto-adjoint A . C'est une technique élégante pour construire des extensions auto-adjointes

d'opérateurs symétriques minorés. L'idée est de partir d'un opérateur A symétrique borné inférieurement défini sur un domaine très petit, puis de calculer la forme quadratique associée q_A . Comme cette dernière est minorée, on peut la fermer par le théorème 3.14, ce qui fournit alors une extension auto-adjointe $B = B^* \supset A$. En particulier, tous les opérateurs symétriques bornés inférieurement ont des extensions auto-adjointes.

Théorème 3.20 (Riesz-Friedrichs). *Soient $\mathcal{Q} \subset \mathfrak{H}$ deux espaces de Hilbert, de normes $\|\cdot\|_{\mathcal{Q}}$ et $\|\cdot\|_{\mathfrak{H}}$ et de produits scalaires $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{Q}}$ et $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathfrak{H}}$. On suppose que \mathcal{Q} est dense et s'injecte continûment dans \mathfrak{H} , c'est-à-dire qu'il existe $\alpha > 0$ tel que*

$$\|v\|_{\mathcal{Q}} \geq \alpha \|v\|_{\mathfrak{H}}, \quad \forall v \in \mathcal{Q}. \quad (3.13)$$

Alors il existe un unique opérateur auto-adjoint A sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, tel que $q_A = \|\cdot\|_{\mathcal{Q}}^2$, $\varphi_A = \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{Q}}$ et $\mathcal{Q} = Q(A)$.

De plus, si B est un opérateur auto-adjoint sur $D(B) \subset \mathcal{Q}$ tel que $D(B)$ est dense dans \mathcal{Q} et $q_B = q$ sur $D(B)$, alors $B = A$.

La dernière propriété est un peu plus forte que l'unicité du début du théorème, car nous ne supposons pas *a priori* que q est la fermeture q_B de la forme quadratique associée à B . Mais c'est ce que nous montrons dans la preuve.

Démonstration. Par le théorème 3.16, on est amené à introduire

$$G(A) = \{(v, z) \in \mathcal{Q} \times \mathfrak{H} : \langle v, h \rangle_{\mathcal{Q}} = \langle z, h \rangle_{\mathfrak{H}}, \forall h \in \mathcal{Q}\}$$

et

$$D(A) := \{v \in \mathcal{Q} : \exists z \in \mathfrak{H}, (v, z) \in G(A)\}.$$

Il est clair que $G(A)$ est un sous-espace vectoriel de $\mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$. Si par ailleurs $(0, z) \in G(A)$ alors on a $\langle z, h \rangle_{\mathfrak{H}} = 0$ pour tout $h \in \mathcal{Q}$, ce qui implique que $z = 0$ puisque \mathcal{Q} est dense dans \mathfrak{H} . Ainsi, $G(A)$ est le graphe d'un opérateur linéaire A défini sur $D(A)$ par $Av = z$. Nous allons vérifier dans un instant que $D(A)$ est un sous-espace dense de \mathfrak{H} .

Pour $v_1, v_2 \in D(A)$, on a

$$\langle Av_1, v_2 \rangle_{\mathfrak{H}} = \langle v_1, v_2 \rangle_{\mathcal{Q}} = \overline{\langle v_2, v_1 \rangle_{\mathcal{Q}}} = \overline{\langle Av_2, v_1 \rangle_{\mathfrak{H}}} = \langle v_1, Av_2 \rangle_{\mathfrak{H}}$$

qui montre immédiatement que l'opérateur A est symétrique sur son domaine.

Soit $z \in \mathfrak{H}$ quelconque. Comme $h \mapsto \langle z, h \rangle_{\mathfrak{H}}$ est une application linéaire continue sur \mathcal{Q} , le théorème de Riesz implique l'existence d'un unique $v \in \mathcal{Q}$ tel que $\langle v, h \rangle_{\mathcal{Q}} = \langle z, h \rangle_{\mathfrak{H}}$ pour tout $h \in \mathcal{Q}$, c'est-à-dire tel que $Av = z$. La preuve habituelle consiste à minimiser la fonctionnelle strictement convexe

$$w \in \mathcal{Q} \mapsto \frac{1}{2} \|w\|_{\mathcal{Q}}^2 - \Re \langle z, w \rangle.$$

L'existence d'un minimiseur est garantie par l'inégalité (3.13) et un argument de minimisation comme à l'exercice 3.18. Ainsi, nous avons montré que l'opérateur A est surjectif de $D(A)$ dans \mathfrak{H} .

Écrivons maintenant la preuve que $D(A)$ est dense. Soit h dans l'orthogonal de $D(A)$ pour le produit scalaire de \mathcal{Q} et, puisque A est surjectif, soit alors $v \in D(A)$ tel que $Av = h$. On a $0 = \langle v, h \rangle_{\mathcal{Q}} = \langle h, h \rangle_{\mathfrak{H}}$ ce qui implique $h = 0$, donc $D(A)$ est dense dans \mathcal{Q} pour la norme de \mathcal{Q} . Puisque \mathcal{Q} est lui-même supposé dense dans \mathfrak{H} , on conclut que $D(A)$ est dense dans \mathfrak{H} .

Comme nous avons déjà montré que A est surjectif de $D(A)$ dans \mathfrak{H} , d'après le théorème 2.36, il suit donc que A est auto-adjoint. Par ailleurs nous avons également prouvé que $D(A)$ est dense dans \mathcal{Q} pour sa norme, et on a donc bien $q_A = \|\cdot\|_{\mathcal{Q}}^2$ comme annoncé.

Il reste finalement à montrer que A est aussi le seul opérateur auto-adjoint dont le domaine est dense dans \mathcal{Q} pour la topologie associée, et dont la forme quadratique coïncide avec q sur son domaine. Soit B un tel autre opérateur. Nous avons par hypothèse $q_B(v) = q(v)$ pour tout $v \in D(B)$ ce qui, par polarisation, implique

$$\langle Bv, h \rangle = \langle v, h \rangle_{\mathcal{Q}}$$

pour tout $v, h \in D(B)$. Comme $D(B)$ est supposé dense dans \mathcal{Q} , cette relation reste vraie pour tout $h \in \mathcal{Q}$. C'est alors exactement la caractérisation du fait que $v \in D(A)$ avec $Av = Bv$. Ainsi, $B \subset A$ ce qui implique $A = B$ car les deux opérateurs sont auto-adjoints. \square

Le résultat précédent permet de définir l'extension de Friedrichs d'un opérateur symétrique coercif.

Corollaire 3.21 (Extension de Friedrichs). *Soit A un opérateur symétrique sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, qui est borné inférieurement. Soit $q = \overline{q_A}$ la fermeture de la forme quadratique associée, construite au théorème 3.14, dont le domaine est noté \mathcal{Q} . Alors il existe une unique extension auto-adjointe B de A , appelée extension de Friedrichs telle que*

$$\boxed{D(A) \subset D(B) \subset \mathcal{Q}.}$$

Plus précisément, on a

$$D(B) = \{v \in \mathcal{Q} : \exists z \in \mathfrak{H}, \langle v, h \rangle_{\mathcal{Q}} = \langle z, h \rangle, \forall h \in \mathcal{Q}\}$$

et

$$q = q_B, \quad \mathcal{Q} = \mathcal{Q}(B).$$

Remarque 3.22. *Une conséquence de ce théorème est que tout opérateur symétrique A borné inférieurement admet au moins une extension auto-adjointe, qui est par ailleurs aussi minorée. En général, les autres extensions possibles n'ont pas toujours un spectre minoré [RS75, p. 179–180].*

Démonstration. Nous avons déjà vu au théorème 3.20 que la forme quadratique q était associée à un unique opérateur auto-adjoint B . L'opérateur B est une extension de A car on a $D(A) \subset \mathcal{Q}$ par construction, donc

$$\langle Bv, h \rangle = \langle v, h \rangle_{\mathcal{Q}} = \langle v, Ah \rangle$$

pour tout $v \in D(B)$ et tout $h \in D(A) \subset \mathcal{Q}$. Ceci montre que $B \subset A^*$ et donc $A \subset \bar{A} = (A^*)^* \subset B^* = B$.

L'unicité suit de la dernière assertion du théorème 3.20. En effet, comme $D(A)$ est par construction dense dans \mathcal{Q} , toute extension auto-adjointe \tilde{B} de A telle que $D(A) \subset D(\tilde{B}) \subset \mathcal{Q}$ a aussi son domaine $D(\tilde{B})$ dense dans \mathcal{Q} . Par ailleurs, on a pour tout $v \in D(\tilde{B})$ et tout $w \in D(A)$

$$\langle \tilde{B}v, w \rangle = \langle v, \tilde{B}w \rangle = \langle v, Aw \rangle = \varphi_B(v, w)$$

puisque $A \subset \tilde{B}$. Comme $D(A)$ est par définition dense dans $\mathcal{Q} = Q(B)$ pour la norme associée, la relation reste vraie dans tout $D(\tilde{B})$ et nous pouvons alors utiliser l'unicité démontrée au théorème 3.20. \square

La méthode de Friedrichs permet de montrer que $A + B$ est auto-adjoint lorsque A l'est et que B est relativement borné, mais en un sens faisant intervenir les formes quadratiques au lieu des opérateurs, comme nous avons vu pour le théorème de Rellich-Kato. Le résultat suivant est dû à Kato, Lions, Lax, Milgram et Nelson [RS75, p. 323].

Théorème 3.23 (KLMN). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, qui est coercif, c'est-à-dire tel que $\langle v, Av \rangle \geq \alpha \|v\|^2$ pour tout $v \in D(A)$ et pour un $\alpha > 0$. Soit q_A la forme quadratique fermée associée, de domaine $Q(A)$. Soit b une autre forme quadratique définie sur $Q(A)$, telle que*

$$|b(v)| \leq \eta q_A(v) + \kappa \|v\|^2, \quad \forall v \in Q(A),$$

pour un réel $0 \leq \eta < 1$ et $\kappa > 0$. Alors $v \mapsto q_A(v) + b(v)$ est fermée sur $Q(A)$ et est donc associée à un unique opérateur auto-adjoint C , qui est tel que $Q(C) = Q(A)$.

Si b est la forme quadratique d'un opérateur symétrique B défini sur $D(A)$, alors C est l'unique extension auto-adjointe de $A + B$ défini sur $D(A + B) = D(A)$, telle que $D(A) \subset D(C) \subset Q(A)$.

Démonstration. Comme

$$(1 - \eta)q_A(v) - \kappa \|v\|^2 \leq q_A(v) + b(v) \leq (1 + \eta)q_A(v) + \kappa \|v\|^2,$$

la forme $v \mapsto q_A(v) + b(v) + (1 + \kappa)\|v\|^2$ est équivalente à q_A sur $Q(A)$. Ainsi $Q(A)$ est également complet pour cette nouvelle forme quadratique et le résultat suit du théorème 3.20. \square

3.3 Formes quadratiques et opérateurs de Schrödinger

Dans cette section nous utilisons les formes quadratiques pour construire des réalisations auto-adjointes des opérateurs de Schrödinger sous la forme

$$H = -\Delta + V(x),$$

en particulier dans le cas où l'opérateur de multiplication par la fonction V n'est pas naturellement défini sur l'espace $D(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^d)$. Ceci comprend par exemple le cas où V est trop singulier, ou alors le cas où $V(x)$ tend vers l'infini à l'infini.

3.3.1 Cas des potentiels singuliers localement

À l'aide du théorème de Rellich-Kato, nous avons vu au corollaire 3.8 que les opérateurs de Schrödinger $H = -\Delta + V(x)$ étaient auto-adjoint sur $D(H) = H^2(\mathbb{R}^d)$ lorsque

$$V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$$

avec

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5. \end{cases} \quad (3.14)$$

Ils sont même essentiellement auto-adjoints sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$, ce qui signifie qu'il n'existe qu'une seule réalisation auto-adjointe possible.

D'un autre côté, nous avons vu auparavant au lemme 1.14 que l'énergie correspondante

$$\mathcal{E}^V(u) = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|u(x)|^2 dx$$

était continue et bornée inférieurement sous l'hypothèse plus faible

$$\begin{cases} p = 1 & \text{si } d = 1, \\ p > 1 & \text{si } d = 2, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 3. \end{cases} \quad (3.15)$$

Plus précisément, on a

$$\varepsilon \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 \leq \mathcal{E}^V(u) + C \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \leq \varepsilon^{-1} \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2$$

pour des constantes $C \in \mathbb{R}$ et $\varepsilon > 0$. Ainsi $\mathcal{E}^V + C\|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2$ définit une forme quadratique équivalente au carré de la norme de $H^1(\mathbb{R}^d)$.

Les deux hypothèses (3.14) et (3.15) diffèrent en dimension $d \leq 4$. L'énergie est minorée pour des potentiels plus singuliers localement que

ceux pour lesquels nous pouvons montrer que l'opérateur est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$.

Plaçons-nous par exemple en dimension $d = 1$. L'hypothèse (3.15) couvre les potentiels tels que

$$V(x) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{c}{|x|^\alpha}, \quad c \neq 0$$

avec $\alpha < 1$ alors que l'opérateur correspondant n'est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R})$ que sous l'hypothèse que $\alpha < 1/2$. En fait, lorsque $1/2 \leq \alpha < 1$, l'opérateur $-\Delta + V(x)$ n'est même pas défini sur $C_c^\infty(\mathbb{R})$ car pour une fonction u telle que $u(0) = 1$, nous aurons $Vu \notin L^2(\mathbb{R})$. Ainsi l'opérateur $-\Delta + V(x)$ n'est pas non plus bien défini sur $H^2(\mathbb{R})$. Ceci nous force à travailler plutôt sur $D(H^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$, un domaine sur lequel H^{\min} est bien défini et symétrique, à condition que V soit par exemple borné en dehors de l'origine. Aucune des extensions auto-adjointes possibles de H^{\min} ne contiendra $H^2(\mathbb{R})$.

Nous voyons sur cet exemple que le domaine le plus petit sur lequel on peut définir l'opérateur $-\Delta + V(x)$ peut dépendre des singularités locales de la fonction V . Ceci complique grandement la construction des extensions auto-adjointes possibles. Cependant, ces subtilités disparaissent lorsqu'on utilise la forme quadratique, qui est toujours définie sur tout $H^1(\mathbb{R}^d)$.

Corollaire 3.24 (Réalisation de Friedrichs pour les potentiels singuliers). *Soit $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec p satisfaisant (3.15). Alors il existe un unique opérateur auto-adjoint H tel que $D(H)$ soit dense dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ et dont la forme quadratique vaut*

$$\langle u, Hu \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|u(x)|^2 dx$$

pour tout $u \in D(H)$. Cet opérateur est défini sur le domaine

$$D(H) = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^d) : -\Delta u + Vu \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

par

$$Hu := -\Delta u + Vu$$

où chaque terme est compris au sens des distributions ou dans $H^{-1}(\mathbb{R}^d)$. On a alors

$$Q(H) = H^1(\mathbb{R}^d).$$

Démonstration. La forme quadratique est coercive et fermée sur $H^1(\mathbb{R}^d)$ par le lemme 1.14. Le théorème 3.20 de Riesz-Friedrichs ou le théorème KLMN 3.23 fournissent alors un unique opérateur auto-adjoint H dont la

forme quadratique est \mathcal{E}^V . Le domaine $D(H)$ est l'ensemble des fonctions $u \in H^1(\mathbb{R}^d)$ pour lesquelles il existe $h \in L^2(\mathbb{R}^d)$ tel que

$$\int_{\mathbb{R}^d} \nabla \overline{v(x)} \cdot \nabla u(x) \, dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x) \overline{v(x)} u(x) \, dx = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{v(x)} h(x) \, dx$$

pour tout $v \in H^1(\mathbb{R}^d)$. C'est exactement la définition du fait que $-\Delta u + Vu = h \in L^2(\mathbb{R}^d)$, ou chaque terme est interprété dans $H^{-1}(\mathbb{R}^d)$. Comme $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ est dense dans $H^1(\mathbb{R}^d)$, il est équivalent de prendre $v \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$, auquel cas chaque terme est maintenant vu comme une distribution. \square

L'unicité de H sous l'hypothèse que $D(H)$ est dense dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ est importante d'un point de vue physique car elle signifie que la contrainte que l'énergie soit finie sur le domaine de H suffit à déterminer l'opérateur H .

Il est important de remarquer que, sur $D(H)$, seule la somme $-\Delta u + Vu$ appartient à $L^2(\mathbb{R}^d)$. Les deux termes peuvent ne pas appartenir à $L^2(\mathbb{R}^d)$ séparément (sinon le domaine serait inclus dans $H^2(\mathbb{R}^d)$). Il est même possible que l'on ait $H^2(\mathbb{R}^d) \cap D(H) = \{0\}$, c'est-à-dire que les deux termes $-\Delta u$ et Vu ne soient *jamais* dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ (exercice 3.33).

Remarque 3.25. *Si V vérifie (3.14) alors $-\Delta + V$ est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$, auquel cas la réalisation de Friedrichs coïncide avec cette dernière, car $H^2(\mathbb{R}^d) \subset H^1(\mathbb{R}^d)$ et est dense dans cet espace.*

3.3.2 Cas d'un potentiel positif quelconque

Jusqu'à présent nous avons principalement étudié les opérateurs de Schrödinger $-\Delta + V(x)$ décrivant une particule soumise à un potentiel extérieur qui reste borné à l'infini. Il est d'usage d'étudier aussi les particules *confinées*, ce qui signifie que

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = +\infty,$$

le représentant le plus classique de cette classe étant l'oscillateur harmonique, obtenu pour $V(x) = |x|^2$.

Avec la technique des formes quadratiques, nous pouvons définir $H = -\Delta + V(x)$ pour un potentiel dont la partie positive est quelconque (localement intégrable), bornée ou pas. Considérons un potentiel $V \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ à valeurs réelles que l'on écrit sous la forme

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

où $V_+ = \max(V, 0)$ et $V_- = \max(-V, 0)$. Nous supposons que

$$V_- \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$$

avec p qui satisfait l'hypothèse (3.15), de sorte que l'énergie potentielle associée puisse être contrôlée par l'énergie cinétique. Pour V_+ nous avons plus

de liberté, car il suffit juste que la forme quadratique soit bien définie, le terme $\int_{\mathbb{R}^d} V_+ |u|^2$ étant toujours positif. Nous demandons alors juste que

$$V_+ \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}).$$

L'énergie

$$\mathcal{E}^V(u) = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|u(x)|^2 dx \quad (3.16)$$

est bien définie sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ (car V_+ est localement intégrable), et nous pouvons la fermer, ce qui mène à introduire l'espace suivant

$$\mathcal{V} := \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^d) : \sqrt{V_+}u \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}. \quad (3.17)$$

On peut vérifier que \mathcal{V} est un espace de Hilbert lorsqu'il est muni de la forme polaire associée à la forme quadratique $\mathcal{E}^V + C\|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2$, où $C > 0$ est choisi assez grand pour que $\mathcal{E}^V + C\|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2$ soit coercive. L'espace (3.17) est le plus grand dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ sur lequel l'énergie \mathcal{E}^V est bien définie. Par ailleurs, $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ est dense dans \mathcal{V} pour la norme associée.

Le résultat suivant se démontre exactement comme le théorème 3.26.

Théorème 3.26 (Réalisation de Friedrichs pour $V_+ \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$). *Soit $V = V_+ - V_-$ avec $V_- \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ où p satisfait (3.15) et $V_+ \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$. Alors il existe un unique opérateur auto-adjoint H tel que $D(H)$ soit dense dans \mathcal{V} et dont la forme quadratique vaut*

$$\langle u, Hu \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|u(x)|^2 dx$$

pour tout $u \in D(H)$. Cet opérateur est défini sur le domaine

$$D(H) = \left\{ u \in \mathcal{V} : -\Delta u + Vu \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

par

$$Hu := -\Delta u + Vu$$

où chaque terme est compris au sens des distributions. On a alors

$$Q(H) = \mathcal{V}.$$

3.3.3 Systèmes confinés, oscillateur harmonique

Comme application des théorèmes précédents, nous considérons l'opérateur $H = -\Delta + V(x)$ et supposons que

$$V, |\nabla V| \in L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^+), \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = +\infty$$

et $|\nabla V(x)| \leq C(1 + |V(x)|)$. (3.18)

L'exemple principal que nous avons en tête est l'oscillateur harmonique

$$H = -\Delta + |x|^2$$

qui correspond à prendre $V(x) = |x|^2$. Cependant, l'hypothèse (3.18) est vérifiée pour tout potentiel V qui se comporte comme $|x|^\alpha$ à l'infini, avec $\alpha > 0$ quelconque.

Comme le potentiel V appartient à $L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d) \subset L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$, nous pouvons définir H^{\min} sur

$$D(H^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Par le corollaire 3.21, H^{\min} admet une *unique extension auto-adjointe* H dont le domaine $D(H)$ est dense dans l'espace d'énergie

$$\mathcal{V} = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^d), \quad \sqrt{|V|}u \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}.$$

Plus précisément

$$D(H) = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^d), \quad \sqrt{|V|}u \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad (-\Delta + V)u \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}.$$

Il est en fait possible de montrer que sur ce domaine, les deux termes $-\Delta u$ et Vu sont séparément dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui est une sorte de théorème de régularité elliptique pour ces opérateurs.

Théorème 3.27 (Domaine pour un potentiel confinant). *On se place en dimension $d \geq 1$. Soit $V \in L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$ tel que $\nabla V \in L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$, $V(x) \rightarrow +\infty$ à l'infini et $|\nabla V(x)| \leq C(1 + |V(x)|)$ pour presque tout $x \in \mathbb{R}^d$. Alors le domaine de l'extension de Friedrichs H de l'opérateur H^{\min} est égal à*

$$D(H) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R}^d), \quad Vu \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

et il existe une constante C (ne dépendant que de V et de d) telle que

$$\begin{aligned} & \|\Delta u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 + \|Vu\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \\ & \leq C \left(\|(-\Delta + V)u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 + \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 + \int_{\mathbb{R}^d} |V(x)| |u(x)|^2 dx \right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

L'opérateur H^{\min} est essentiellement auto-adjoint sur $D(H^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ avec, bien sûr,

$$\overline{H^{\min}} = H.$$

Démonstration. Pour $u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$, on écrit

$$\begin{aligned} \|(-\Delta + V)u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} |\Delta u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)^2 |u(x)|^2 dx \\ &\quad - 2\Re \int_{\mathbb{R}^d} V(x) \overline{u(x)} \Delta u(x) dx. \end{aligned}$$

Or on a

$$2\Re \overline{u(x)} \Delta u(x) = 2\Re \operatorname{div}(\overline{u(x)} \nabla u(x)) - 2|\nabla u(x)|^2$$

ce qui donne la relation

$$\begin{aligned} \|(-\Delta + V)u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} |\Delta u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)^2 |u(x)|^2 dx \\ &+ 2 \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\nabla u(x)|^2 dx + 2\Re \int_{\mathbb{R}^d} \overline{u(x)} \nabla V(x) \cdot \nabla u(x) dx \end{aligned} \quad (3.20)$$

en intégrant par parties. Cette relation suggère que Δu , Vu et $\sqrt{|V|}u$ doivent appartenir à $L^2(\mathbb{R}^d)$ lorsque $(-\Delta + V)u \in L^2(\mathbb{R}^d)$, car le dernier terme peut être contrôlé (nous allons le faire en détail plus bas). Malheureusement notre calcul ne fait pas sens dans $D(H)$ et il va falloir étendre la formule à cet espace.

Soit donc $u \in H^1(\mathbb{R}^d)$ tel que $\sqrt{|V|}u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et $-\Delta u + Vu \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Comme V est borné localement, nous avons $\Delta u \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$ et comme $\nabla u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ par hypothèse, nous en déduisons que $u \in H^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$. Soit alors $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ une fonction radiale positive à support dans la boule de rayon 2, qui vaut $\chi \equiv 1$ sur la boule de rayon 1. On pose alors $\chi_R(x) = \chi(x/R)$. Grâce au fait que $u \in H^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$, nous pouvons calculer comme précédemment

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) |-\Delta u(x) + V(x)u(x)|^2 dx &= \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) |\Delta u(x)|^2 dx \\ &+ \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) V(x)^2 |u(x)|^2 dx + 2 \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) V(x) |\nabla u(x)|^2 dx \\ &+ 2\Re \int_{\mathbb{R}^d} \overline{u(x)} \nabla(\chi_R V)(x) \cdot \nabla u(x) dx. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Afin d'utiliser l'hypothèse (3.18) on effectue des intégrations par parties successives pour écrire le dernier terme sous une forme que l'on peut contrôler facilement :

$$\begin{aligned} &2\Re \int_{\mathbb{R}^d} \overline{u(x)} \nabla(\chi_R V)(x) \cdot \nabla u(x) dx \\ &= 2\Re \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) \overline{u(x)} \nabla V(x) \cdot \nabla u(x) dx + 2\Re \int_{\mathbb{R}^d} V(x) \overline{u(x)} \nabla \chi_R(x) \cdot \nabla u(x) dx \\ &= 2\Re \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) \overline{u(x)} \nabla V(x) \cdot \nabla u(x) dx - \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 \operatorname{div}(V \nabla \chi_R)(x) dx \\ &= 2\Re \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) \overline{u(x)} \nabla V(x) \cdot \nabla u(x) dx - \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 \nabla V(x) \cdot \nabla \chi_R(x) dx \\ &\quad - \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 V(x) \Delta \chi_R(x) dx. \end{aligned}$$

Tous les calculs sont justifiés car $\chi_R \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $u \in H^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$. Nous avons ici utilisé que $2\Re \overline{u} \nabla u = \nabla |u|^2$. Par l'inégalité de Cauchy-Schwarz et

l'hypothèse (3.18), nous obtenons la borne inférieure

$$\begin{aligned}
 & 2\Re \int_{\mathbb{R}^d} \overline{u(x)} \nabla(\chi_R V)(x) \cdot \nabla u(x) \, dx \\
 & \geq -C \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) (1 + |V(x)|) |\nabla u(x)| |u(x)| \, dx - \frac{C}{R} \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |V(x)|) |u(x)|^2 \, dx \\
 & \quad - \frac{C}{R^2} \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 |V(x)| \, dx \\
 & \geq -C \left(\int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) |V(x)| |u(x)|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) |V(x)| |\nabla u(x)|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
 & \quad - C \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 - \frac{C}{R} \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |V(x)|) |u(x)|^2 \, dx - \frac{C}{R^2} \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 |V(x)| \, dx \\
 & \geq - \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) |V(x)| |\nabla u(x)|^2 \, dx - C \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) |V(x)| |u(x)|^2 \, dx \\
 & \quad - C \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 - \frac{C}{R} \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |V(x)|) |u(x)|^2 \, dx - \frac{C}{R^2} \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 |V(x)| \, dx,
 \end{aligned}$$

car $|\nabla \chi_R| \leq C/R$ et $|\Delta \chi_R| \leq C/R^2$. Dans ce calcul, C est une constante générique qui peut changer d'une ligne à l'autre. En utilisant l'inégalité

$$Cab \leq a^2 + \frac{C^2}{4} b^2,$$

nous avons pu mettre une constante 1 devant le terme $\int_{\mathbb{R}^d} \chi_R |V| |\nabla u|^2$ ce qui permet de le contrôler par celui de (3.21), qui lui a un facteur 2. Nous avons donc prouvé l'inégalité suivante

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) |\Delta u(x)|^2 \, dx + \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) V(x)^2 |u(x)|^2 \, dx \\
 & \quad + \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) (2V(x) - |V(x)|) |\nabla u(x)|^2 \, dx \\
 & \leq \int_{\mathbb{R}^d} \chi_R(x) |-\Delta u(x) + V(x)u(x)|^2 \, dx + C \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 \\
 & \quad + C \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |u(x)|^2 \, dx. \tag{3.22}
 \end{aligned}$$

Comme $u \in \mathcal{V}$ et $(-\Delta + V)u \in L^2(\mathbb{R}^d)$, le terme à droite est uniformément borné par rapport à R . On en déduit en passant à la limite $R \rightarrow \infty$, que les trois fonctions Δu , Vu et $\sqrt{|V|} \nabla u$ appartiennent à $L^2(\mathbb{R}^d)$. Puis on trouve les relations (3.20) et (3.19) en passant à la limite. Comme

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\nabla u(x)|^2 \, dx &= -\Re \int_{\mathbb{R}^d} \overline{u(x)} \nabla V(x) \cdot \nabla u(x) \, dx \\
 & \quad - \Re \int_{\mathbb{R}^d} V(x) \overline{u(x)} \Delta u(x) \, dx
 \end{aligned}$$

la propriété que $\sqrt{|V|} \nabla u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ suit déjà de l'information que Δu et Vu sont dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, d'après notre hypothèse (3.18) sur ∇V .

Pour montrer que $H = \overline{H^{\min}}$ nous devons prouver que pour toute fonction $u \in D(H)$ il existe une suite $u_n \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ telle que $u_n \rightarrow u$ et $Hu_n \rightarrow Hu$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. D'après (3.20), il suffit de montrer que $u_n \rightarrow u$ dans $H^2(\mathbb{R}^d)$ et $Vu_n \rightarrow Vu$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Nous pouvons commencer par approcher u par une fonction v_n dans $D(H)$ à support compact (mais pas forcément C^∞). En utilisant le fait que V est borné localement, le résultat suivra alors de la densité habituelle de $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ dans $H^2(\mathbb{R}^d)$. Nous pouvons prendre, simplement,

$$v_n(x) = \chi(x/n)u(x)$$

où $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ est une fonction telle que $\int_{\mathbb{R}^d} \chi = 1$ et $\chi(1) = 1$. Alors

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} V(x)^2 |v_n(x) - u(x)|^2 dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} V(x)^2 (1 - \chi(x/n))^2 |u(x)|^2 dx = 0$$

par convergence dominée, puisque $Vu \in L^2(\mathbb{R}^d)$. L'argument est le même pour conclure que $v_n \rightarrow u$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. De plus,

$$\Delta(\chi(x/n)u(x)) = u(x) \frac{(\Delta\chi)(x/n)}{n^2} + 2 \frac{\nabla u(x) \cdot (\nabla\chi)(x/n)}{n} + \chi(x/n)\Delta u(x)$$

qui converge fortement vers Δv dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui implique la convergence de v_n vers u dans $H^2(\mathbb{R}^d)$. \square

Remarque 3.28. Si ΔV est bien défini, alors le dernier terme de (3.20) est aussi égal à

$$2\Re \int_{\mathbb{R}^d} \overline{u(x)} \nabla V(x) \cdot \nabla u(x) dx = - \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 \Delta V(x) dx$$

et l'argument est plus simple. Pour l'oscillateur harmonique, on trouve simplement $-2d \int_{\mathbb{R}^d} |u|^2$.

Remarque 3.29. Il est possible de partir de H^{\min} et de montrer directement que cet opérateur est essentiellement auto-adjoint. Son adjoint est H^{\max} défini sur

$$D(H^{\max}) = \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}^d) : (-\Delta + V)u \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}.$$

Afin de montrer que cet opérateur est symétrique, nous devons d'abord prouver que toute fonction $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ telle que $(-\Delta + V)u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ appartient en fait à $H^2(\mathbb{R}^d)$ avec $Vu \in L^2(\mathbb{R}^d)$. C'est un résultat de type "régularité elliptique" plus fort que celui du théorème 3.27 car nous ne disposons pas de l'information supplémentaire que $u \in H^1(\mathbb{R}^d)$ et $\sqrt{V}u \in L^2(\mathbb{R}^d)$, information que nous avons abondamment utilisée dans la preuve. L'utilisation de la théorie des formes quadratiques a permis d'obtenir ces deux propriétés de façon rapide, sans avoir à étudier trop précisément les propriétés de régularité des solutions de l'équation $(-\Delta + V)u = f \in L^2(\mathbb{R}^d)$.

3.3.4 Laplacien sur un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ *

Soit Ω un ouvert borné de \mathbb{R}^d dont la frontière est Lipschitzienne. On appelle *Laplacien de Dirichlet* l'unique extension auto-adjointe $(-\Delta)_{\text{Rob},0}$ de l'opérateur $(-\Delta)^{\text{min}}$ défini sur $D((-\Delta)^{\text{min}}) = C_c^\infty(\Omega)$, telle que

$$q_{(-\Delta)_{\text{Rob},0}}(u) = \int_{\Omega} |\nabla u(x)|^2 dx, \quad \text{sur } Q((-\Delta)_{\text{Rob},0}) = H_0^1(\Omega).$$

Souvent nous écrivons

$$(-\Delta)_{\text{Dir}} := (-\Delta)_{\text{Rob},0}$$

pour simplifier les notations.

De la même façon, on appelle *Laplacien de Robin de paramètre $\theta \in]0, 1[$* l'unique extension auto-adjointe $(-\Delta)_{\text{Rob},\theta}$ de $(-\Delta)^{\text{min}}$ dont la forme quadratique est égale à

$$q_{(-\Delta)_{\text{Rob},\theta}}(u) = \int_{\Omega} |\nabla u(x)|^2 dx + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |u(x)|^2 dx, \\ \text{sur } Q((-\Delta)_{\text{Rob},\theta}) = H^1(\Omega). \quad (3.23)$$

Le terme de bord fait sens et $q_{(-\Delta)_{\text{Rob},\theta}}$ équivaut à la norme $H^1(\Omega)$ grâce à l'inégalité (A.14) du théorème A.6. Pour $\theta = 1/2$, nous retrouvons le Laplacien de Neumann et écrivons fréquemment

$$(-\Delta)_{\text{Neu}} := (-\Delta)_{\text{Rob},1/2}$$

pour simplifier les notations.

La détermination explicite du domaine des opérateurs ainsi obtenus est assez difficile. Lorsque Ω est assez lisse ou est convexe au voisinage de son bord, il est possible de montrer que

$$D((-\Delta)_{\text{Rob},\theta}) = \{u \in H^2(\Omega) : \cos(\pi\theta)u|_{\partial\Omega} + \sin(\pi\theta)\partial_n u|_{\partial\Omega} \equiv 0\} \\ \subset H^2(\Omega), \quad (3.24)$$

en utilisant le théorème A.18 de régularité elliptique. Cependant il peut arriver que $D((-\Delta)_{\text{Rob},\theta}) \not\subset H^2(\Omega)$ lorsque Ω n'est pas convexe au voisinage de son bord.

Exemple 3.30 (Laplacien sur un secteur angulaire dans \mathbb{R}^2). *Considérons le secteur angulaire d'angle φ_0*

$$\Omega_{\varphi_0} = \{x = r(\cos(\varphi), \sin(\varphi)) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq r \leq 1, 0 \leq \varphi \leq \varphi_0\},$$

comme à la figure 3.1, et qui peut servir de prototype "local" pour les coins de tout domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^2$.

On cherche des solutions de l'équation aux valeurs propres $-\Delta f = \lambda f$ avec $f \in H_0^1(\Omega_{\varphi_0})$, sous la forme $f(r, \varphi) = u(r) \sin(n\pi\varphi/\varphi_0)$. La condition

de Dirichlet signifie que $u(0) = u(1) = 0$. En utilisant la formule du Laplacien en coordonnées cylindriques, on trouve que u doit résoudre l'équation différentielle

$$r^2 u''(r) + r u'(r) + \left(\lambda r^2 - \frac{n^2 \pi^2}{\varphi_0^2} \right) u(r) = 0.$$

L'unique solution qui admet une limite en $r = 0$ s'exprime sous la forme

$$u(r) = J_{n\pi/\varphi_0}(\sqrt{\lambda} r)$$

où

$$J_\alpha(r) = \sum_{m \geq 0} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m + \alpha + 1) 2^{2m + \alpha}} r^{2m + \alpha}$$

est la fonction de Bessel du premier type. En ajoutant la contrainte que $u(1) = 0$, nous en déduisons donc que les fonctions propres du Laplacien de Dirichlet sur le secteur angulaire sont données par la formule

$$f_{n,\ell}(r, \varphi) = J_{n\pi/\varphi_0}(\sqrt{\lambda_{n,\ell}} r) \sin\left(\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}\right), \quad (3.25)$$

où, pour chaque entier $n \geq 1$, les valeurs propres $\lambda_{n,\ell}$ sont déterminées par la condition que $J_{n\pi/\varphi_0}(\sqrt{\lambda_{n,\ell}}) = 0$, c'est-à-dire les valeurs propres sont les carrés des zéros de $J_{n\pi/\varphi_0}$, pour chaque $n \geq 1$. Par exemple, la première fonction propre est associée à la valeur propre égale au carré du premier zéro de la fonction J_{π/φ_0} (qui correspond à prendre $n = 1$).

Le résultat est similaire pour le Laplacien de Neumann, dont les fonctions propres peuvent s'écrire

$$g_{n,\ell}(r, \varphi) = J_{n\pi/\varphi_0}(\sqrt{\lambda_{n,\ell}} r) \cos\left(\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}\right) \quad (3.26)$$

où les $\lambda_{n,\ell}$ sont cette fois choisis de sorte que $J'_{n\pi/\varphi_0}(\sqrt{\lambda_{n,\ell}}) = 0$, en autorisant $n = 0$ qui correspond à la fonction constante. Le cas du Laplacien de Robin est également du même type.

Nous pouvons maintenant lire la régularité des fonctions propres du Laplacien de Dirichlet dans le secteur Ω_{φ_0} sur la formule (3.25). En effet, la fonction de Bessel $J_\alpha(r)$ est égale à r^α multipliée par une fonction entière du paramètre $r^2 = x^2 + y^2$ (donc $C^\infty(\Omega_{\varphi_0})$) et c'est donc le terme

$$r^{n\pi/\varphi_0} \sin\left(\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}\right)$$

qui détermine toute la régularité des fonctions propres. Si $\pi/\varphi_0 = m$ est un entier, alors il est facile de vérifier que $r^{nm} \sin(nm\varphi)$ est un polynôme en $x = r \cos \varphi$ et $y = r \sin \varphi$, et ainsi la fonction propre correspondante est C^∞ .

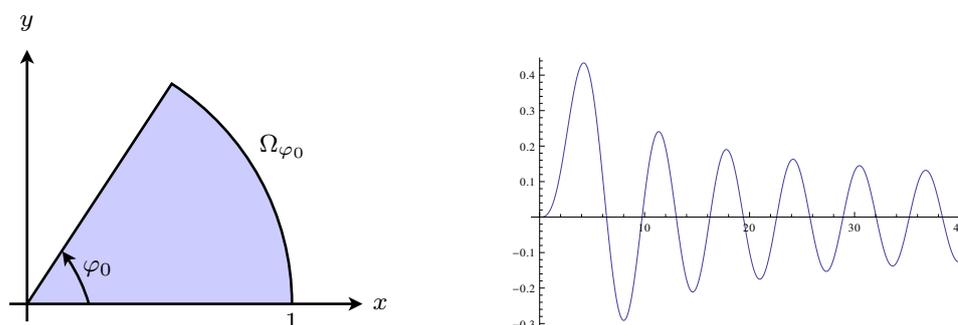


FIGURE 3.1 – Les fonctions et valeurs propres du Laplacien sur un secteur d'angle φ_0 (gauche) peuvent s'exprimer à l'aide de la fonction de Bessel $J_{n\pi/\varphi_0}$ dessinée à droite pour $\varphi_0 = \pi/3$ et $n = 1$.

Par contre, si π/φ_0 n'est pas un entier, la fonction propre est dans H^s au voisinage de 0 seulement pour $s < \pi/\varphi_0 + 1$. Le domaine du Laplacien avec les conditions aux bords considérées ne peut donc être inclus dans $H^s(\Omega)$ pour $s \geq \pi/\varphi_0 + 1$. Si l'angle φ_0 est strictement supérieur à π (cas d'un angle rentrant), alors la première fonction propre n'est même pas dans $H^2(\Omega)$.

Exercices complémentaires

Exercice 3.31 (Champ magnétique II). À l'exemple 3.10 nous avons négligé le spin pour simplifier. Le spin interagit avec le champ magnétique par l'intermédiaire du terme de Zeeman. Si $f \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$, on doit alors considérer l'opérateur de Pauli

$$\tilde{H}_A f = (P + A)^2 f + \sum_{j=1}^3 B_j(x) \sigma_j$$

où les σ_j sont les matrices de Pauli définies par

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

et où $B = \text{rot} A$ est le champ magnétique. Montrer que l'opérateur de Pauli \tilde{H}_A est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^3)$ quand $A \in L^4(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, $\text{div} A \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ et $B = \text{rot} A \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Exercice 3.32 (Potentiels dans $L^p_{\text{unif}}(\mathbb{R}^d)$, opérateurs périodiques). Soit V une fonction à valeurs réelles dans l'espace $L^p_{\text{unif}}(\mathbb{R}^d)$, c'est-à-dire telle que $V \in L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$ et

$$\sup_{\ell \in \mathbb{Z}^d} \|V\|_{L^p(C_\ell)} < \infty$$

où $C_\ell = \ell + [-1/2, 1/2]^d$ est le cube unité centré en ℓ . Montrer que si p satisfait la condition (3.3), alors tout $V \in L^p_{\text{unif}}(\mathbb{R}^d)$ satisfait (3.4) et (3.5).

Ceci permet de couvrir les opérateurs de Schrödinger $-\Delta + V$ où V est une fonction périodique de $L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$, ce qui est adéquat pour décrire des cristaux quantiques.

Exercice 3.33 (On peut avoir $H^2(\mathbb{R}^d) \cap D(H) = \{0\}$). *Travaillons en dimension $d \leq 3$, de sorte que toutes les fonctions de $H^2(\mathbb{R}^d)$ soient continues. Soit (R_n) une suite dense quelconque de \mathbb{R}^d et considérons le potentiel*

$$V(x) = \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n^2 |x - R_n|^\alpha}$$

Montrer que \mathcal{E}^V à la formule (3.16) est bien définie et équivalente à la norme de $H^1(\mathbb{R}^d)$ pour tout $0 < \alpha < d$, mais que l'opérateur $H = -\Delta + V$ défini au corollaire 3.24 satisfait

$$H^2(\mathbb{R}^d) \cap D(H) = \{0\} \quad \text{et même} \quad C_c^\infty(\mathbb{R}^d) \cap D(H) = \{0\}$$

dès que $d/2 \leq \alpha < d$.

Chapitre 4

Théorème spectral et calcul fonctionnel

Ce chapitre est dédié aux résultats concernant la diagonalisation des opérateurs auto-adjoints en dimension infinie, c'est-à-dire à la généralisation du théorème dû à Cauchy en 1826 qui stipule que “toute matrice hermitienne est diagonalisable dans une base orthonormée”. Comme le spectre des opérateurs auto-adjoints en dimension infinie ne contient pas que des valeurs propres, comme nous l'avons vu sur plusieurs exemples, l'énoncé du théorème correspondant est bien sûr plus subtil. En dimension infinie, il n'y a en fait pas 'un' théorème spectral, mais plusieurs résultats équivalents les uns aux autres, chaque auteur préférant mettre en avant l'un ou l'autre. Comme dans [RS72, Dav95] nous donnons ici la priorité au théorème qui stipule que *tout opérateur auto-adjoint est unitairement équivalent à un opérateur de multiplication*, c'est-à-dire sous la forme $f(x) \mapsto a(x)f(x)$ sur un espace $L^2(B, d\mu)$. Lorsque $B = \{x_1, \dots, x_d\}$ est l'union de d points distincts et que la mesure μ charge tous ces points, alors $L^2(\{x_1, \dots, x_d\}, d\mu) \simeq \mathbb{C}^d$ et un opérateur de multiplication n'est rien d'autre qu'une matrice diagonale, de coefficients $a(x_i)$. Nous mentionnons d'autres énoncés, en particulier la construction du calcul fonctionnel, qui est un élément important dans la preuve du théorème spectral.

Le théorème spectral, dans n'importe laquelle de ses formulations équivalentes, est sans aucun doute le résultat mathématique central de la théorie des opérateurs auto-adjoints non bornés.

4.1 Opérateurs de multiplication

Soit B un ensemble borélien de \mathbb{R}^d et μ une mesure borélienne positive sur B , que l'on suppose *localement finie*, ce qui signifie que $\mu(B \cap C) < \infty$ pour tout borné $C \subset \mathbb{R}^d$. Nous allons étudier des opérateurs particuliers sur l'espace de Hilbert $\mathfrak{H} = L^2(B, d\mu)$ (les fonctions sont toutes à valeurs complexes).

L'hypothèse que μ est localement finie suffit à assurer que $L^2(B, d\mu)$ contient toutes les fonctions de $L_c^\infty(B, d\mu)$, c'est-à-dire bornées à support compact, qui forment alors un sous-espace dense de \mathfrak{H} . En effet, on peut

écrire pour tout $v \in L^2(B, d\mu)$

$$v = v\mathbb{1}(|v| \geq R) + v\mathbb{1}(|v| \leq R)\mathbb{1}(|x| \geq R') + v\mathbb{1}(|v| \leq R)\mathbb{1}(|x| \leq R') \quad (4.1)$$

où les deux premières fonctions tendent vers 0 dans $L^2(B, d\mu)$ par convergence dominée, lorsque $R, R' \rightarrow \infty$.

Le choix de l'espace $L^2(B, d\mu)$ permet de couvrir de nombreux exemples de façon unifiée, en faisant varier la mesure μ .

Exemple 4.1 (Spin). *Pour une particule avec spin évoluant dans \mathbb{R}^d , nous devons travailler dans $L^2(\mathbb{R}^d \times \{\uparrow, \downarrow\}, \mathbb{C})$. On peut plonger $\mathbb{R}^d \times \{\uparrow, \downarrow\}$ dans \mathbb{R}^{d+1} en prenant deux copies de \mathbb{R}^d par exemple en $x_{d+1} = 0$ et $x_{d+1} = 1$, ce qui revient à travailler avec $B = \mathbb{R}^d \times \{0, 1\} \subset \mathbb{R}^{d+1}$. La mesure correspondante μ vaut alors*

$$\mu = \text{Leb}_{\mathbb{R}^d} \otimes (\delta_0 + \delta_1).$$

Exemple 4.2 (Matrices hermitiennes). *Soit $B = \{x_1, \dots, x_d\}$ un ensemble de d points distincts dans \mathbb{R} et μ la mesure $\sum_{j=1}^d \delta_{x_j}$. Alors $\mathfrak{H} = L^2(B, d\mu) \simeq \mathbb{C}^d$, de sorte que toute matrice hermitienne de taille $d \times d$ s'identifie à un opérateur auto-adjoint sur \mathfrak{H} . L'image d'une fonction $f \in L^2(B, d\mu)$ est par définition la fonction $g \in L^2(B, d\mu)$ telle que $g(x_i) = \sum_{k=1}^d M_{ki} f(x_k)$. En particulier, si M est une matrice diagonale, on voit que l'opérateur peut aussi s'écrire $f \mapsto af$ où a est la fonction telle que $a(x_i) = M_{ii}$.*

L'exemple précédent amène naturellement la définition suivante.

Définition 4.3 (Opérateurs de multiplication). *Soit a une fonction de $L^2_{\text{loc}}(B, d\mu)$ (à valeurs complexes), c'est-à-dire telle que $\int_{B \cap B_R} |a|^2 d\mu < \infty$ pour toute boule B_R de rayon R , centrée à l'origine. On appelle opérateur minimal de multiplication et on note M_a^{\min} l'opérateur défini par*

$$(M_a^{\min}v)(x) = a(x)v(x)$$

sur le domaine

$$D(M_a^{\min}) = L^\infty_c(M, d\mu)$$

des fonctions bornées à support compact. On appelle opérateur maximal de multiplication et on note M_a l'opérateur défini par

$$(M_a v)(x) = a(x)v(x)$$

sur le domaine

$$D(M_a) = \{v \in L^2(B, d\mu) : av \in L^2(B, d\mu)\}.$$

Le résultat principal de cette section est le suivant.

Théorème 4.4 (Opérateurs de multiplication). *Soit $a \in L^2_{\text{loc}}(B, d\mu)$. Alors :*

- (i) *L'opérateur M_a^{\min} est fermable et sa fermeture vaut $\overline{M_a^{\min}} = M_a$. Le spectre de ce dernier vaut*

$$\sigma(M_a) = \text{ImEss}(a), \quad (4.2)$$

l'image essentielle de la fonction a définie par

$$\text{ImEss}(a) = \left\{ y \in \mathbb{C} : \mu(\{x : |a(x) - y| \leq \varepsilon\}) > 0, \forall \varepsilon > 0 \right\}.$$

- (ii) *Les valeurs propres de M_a sont les $\lambda \in \text{ImEss}(a)$ tels que*

$$\mu(\{x : a(x) = \lambda\}) = \mu(\{a = \lambda\}) > 0$$

et l'espace propre correspondant est

$$\ker(M_a - \lambda) = L^2(\{a = \lambda\}, d\mu),$$

l'espace de toutes les fonctions à support dans l'ensemble $\{a = \lambda\}$, définies μ presque partout.

- (iii) *Si a est une fonction bornée, alors M_a est un opérateur borné, de norme*

$$\|M_a\| = \|a\|_{L^\infty(B, d\mu)}. \quad (4.3)$$

- (iv) *Si a est une fonction à valeurs réelles (bornée ou pas), alors M_a est auto-adjoint (donc M_a^{\min} est essentiellement auto-adjoint).*

Démonstration. Nous avons déjà étudié des opérateurs sous cette forme, par exemple le Laplacien ou l'impulsion après avoir appliqué la transformée de Fourier. La preuve dans le cas général est très similaire.

Si $v \in D(M_a)$ on peut construire une suite $v_n \in L^\infty_c(B, d\mu)$ telle que $v_n \rightarrow v$ et $av_n \rightarrow av$ dans $L^2(B, d\mu)$, en utilisant la décomposition vue en (4.1). Ceci montre que $\overline{M_a^{\min}} = M_a$.

Soit alors $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \text{ImEss}(a)$, ce qui signifie d'après la définition qu'il existe $\varepsilon > 0$ tel que $|a - \lambda| \geq \varepsilon$ μ -presque partout. En particulier, nous avons $|(a - \lambda)^{-1}| \leq \varepsilon^{-1}$ μ -presque partout. Pour tout $v \in L^2(B, d\mu)$, la fonction $v(a - \lambda)^{-1}$ est dans $D(M_a)$ puisque

$$\int_B \frac{|v(x)|^2}{|a(x) - \lambda|^2} d\mu(x) \leq \varepsilon^{-2} \int_B |v(x)|^2 d\mu(x) < \infty$$

et

$$\int_B \frac{|a(x)|^2 |v(x)|^2}{|a(x) - \lambda|^2} d\mu(x) \leq (1 + |\lambda| \varepsilon^{-1})^2 \int_B |v(x)|^2 d\mu(x) < \infty,$$

car

$$\frac{a(x)}{a(x) - \lambda} = 1 + \frac{\lambda}{a(x) - \lambda}.$$

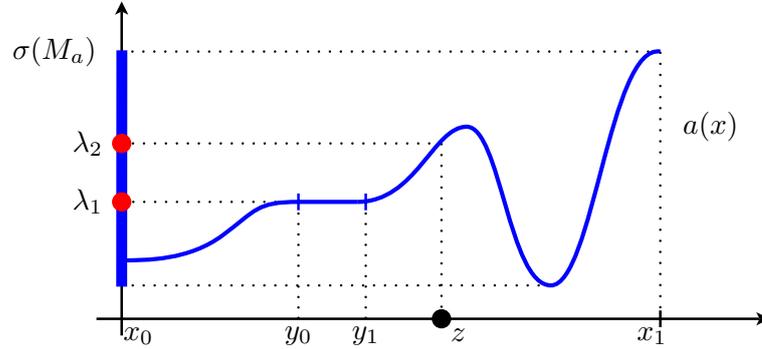


FIGURE 4.1 – Exemple d’une fonction a définie sur l’intervalle $[x_0, x_1]$, que l’on munit de la mesure $\mu = \text{Leb}_{[x_0, x_1]} + \delta_z$ (la mesure de Lebesgue à laquelle on ajoute un atome en z). Le spectre de l’opérateur de multiplication M_a correspondant est l’image $a([x_0, x_1])$, avec seulement deux valeurs propres $\lambda_1 = a(y_0)$ et $\lambda_2 = a(z)$. La première est de multiplicité infinie et $\ker(M_a - \lambda_1)$ est l’espace des fonctions de carré intégrable qui sont supportées dans l’intervalle $[y_0, y_1]$. La seconde est de multiplicité 1 et $\ker(M_a - \lambda_2) \simeq \mathbb{C}$ est l’ensemble des fonctions qui s’annulent presque partout, sauf éventuellement au point z .

Nous voyons alors que $v \mapsto v(a - \lambda)^{-1}$ est l’inverse de $(M_a - \lambda)$ et qu’il est borné par ε^{-1} . Ainsi, $\lambda \notin \sigma(M_a)$, ce qui montre que $\sigma(M_a) \subset \text{ImEss}(a)$.

Réciproquement, si $\lambda \in \text{ImEss}(a)$, alors on a $\mu(\{|a - \lambda| \leq 1/n\}) > 0$ pour tout n donc il existe un rayon R_n tel que

$$0 < \mu(\{|a - \lambda| \leq 1/n\} \cap B_{R_n}) < \infty.$$

Nous préférons travailler avec un ensemble de mesure finie, car rien n’empêche $\mu(\{|a - \lambda| \leq 1/n\}) = +\infty$. Alors, la fonction

$$v_n = \frac{\mathbb{1}_{\{|a - \lambda| \leq 1/n\} \cap B_{R_n}}}{\mu(\{|a - \lambda| \leq 1/n\} \cap B_{R_n})^{1/2}}$$

est normalisée dans $L^2(B, d\mu)$. Comme on a

$$\|(M_a - \lambda)v_n\|^2 = \frac{\int_B \mathbb{1}_{\{|a - \lambda| \leq 1/n\} \cap B_{R_n}}(x) |a(x) - \lambda|^2 d\mu(x)}{\mu(\{|a - \lambda| \leq 1/n\} \cap B_{R_n})} \leq \frac{1}{n^2}$$

nous voyons que $M_a - \lambda$ ne peut pas avoir d’inverse borné, donc que $\lambda \in \sigma(M_a)$, ce qu’il restait à démontrer pour avoir égalité $\sigma(M_a) = \text{ImEss}(a)$. Ceci montre en particulier que M_a est auto-adjoint si et seulement si a est réelle μ -presque partout, c’est-à-dire $\text{ImEss}(a) \subset \mathbb{R}$, d’après le théorème 2.36. D’autre part, v est un vecteur propre de M_a si et seulement si

$$(a(x) - \lambda)v(x) = 0$$

μ -presque partout, ce qui est équivalent à dire que v a son support dans l'ensemble où $a = \lambda$. De telles fonctions existent si et seulement cet ensemble est de mesure non nulle.

Enfin, si a est bornée, nous avons évidemment $\|M_a\| \leq \|a\|_{L^\infty(B, d\mu)}$. L'inégalité opposée est obtenue en construisant une suite v_n de la même façon que précédemment, sur l'ensemble $\{|a| \geq \|a\|_{L^\infty(B, d\mu)} - 1/n\}$. \square

4.2 Théorème spectral

Nous sommes maintenant prêts à diagonaliser tous les opérateurs auto-adjoints. L'énoncé suivant signifie que tout opérateur auto-adjoint est en fait un opérateur de multiplication sur un bon espace.

Théorème 4.5 (Théorème spectral). *Soit $(A, D(A))$ un opérateur auto-adjoint sur un espace de Hilbert séparable \mathfrak{H} . Alors il existe $d \geq 1$, un borélien $B \subset \mathbb{R}^d$, une mesure borélienne localement finie μ sur B , une fonction localement bornée $a \in L^\infty_{\text{loc}}(B, d\mu)$ à valeurs réelles, et une isométrie $U : \mathfrak{H} \rightarrow L^2(B, d\mu)$ tels que*

$$UAU^* = M_a, \quad UD(A) = D(M_a).$$

Plus précisément, il est possible de prendre

$$d = 2, \quad B = \sigma(A) \times \mathbb{N} \subset \mathbb{R}^2, \quad a(s, n) = s.$$

Remarque 4.6. *Alors que nous avons défini M_a avec la seule hypothèse que $a \in L^\infty_{\text{loc}}(B, d\mu)$, le théorème stipule que pour un opérateur auto-adjoint on peut toujours prendre $a \in L^\infty_{\text{loc}}(B, d\mu)$. C'est bien sûr évident pour $a(s, n) = s$ lorsque $B = \sigma(A) \times \mathbb{N} \subset \mathbb{R}^2$.*

Le fait que l'on puisse prendre $B = \sigma(A) \times \mathbb{N} \subset \mathbb{R}^2$ et $a(s, n) = s$ signifie que toute la structure de l'opérateur A peut être contenue dans la mesure μ (en plus bien sûr du spectre $\sigma(A)$). Dans la plupart des cas il n'est pas utile de savoir que l'on peut faire ce choix particulier, mais parfois ceci simplifie quelques arguments, puisque l'image réciproque de tout y par la fonction a est évidemment donnée par

$$\{a = y\} = \bigcup_{n \in \mathbb{N}} \{(y, n)\}$$

où on ne peut retenir que les points qui sont chargés par la mesure μ , puisqu'on travaille toujours μ -presque partout. En particulier, d'après le théorème 4.4, nous avons

$$\ker(A - \lambda) = U^*L^2(\{\lambda\} \times \mathbb{N}, d\mu)$$

et la multiplicité d'une valeur propre éventuelle est donnée par

$$\dim \ker(A - \lambda) = \#\{n \in \mathbb{N} : \mu(\{(\lambda, n)\}) > 0\}.$$

Ainsi, l'ajout de \mathbb{N} au spectre sert (entre autre) à tenir compte de la multiplicité des valeurs propres.

Remarque 4.7 (Support de μ). *Dans la représentation où A est l'opérateur de multiplication par la fonction $(s, n) \mapsto s$, nous voyons que l'on doit avoir*

$$\mu([\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon] \times \mathbb{N}) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \mu([\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon] \times \{n\}) \neq 0$$

pour tout $\lambda \in \sigma(A)$, sinon λ ne pourrait pas être dans le spectre de A .

Remarque 4.8. *La représentation comme un opérateur de multiplication n'est pas unique. Par exemple nous avons déjà vu que le Laplacien sur \mathbb{R}^d était unitairement équivalent à la multiplication par la fonction $a(k) = |k|^2$ sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, donc avec $B = \mathbb{R}^d$, μ la mesure de Lebesgue, et U la transformation de Fourier. En passant en coordonnées radiales et en introduisant l'espace $L^2(\mathbb{S}^{d-1}, \mathbb{C})$, il est possible de réécrire cet opérateur sous la forme $\tilde{a}(s, n) = s$ sur $\tilde{B} = \mathbb{R}^+ \times \mathbb{N} \subset \mathbb{R}^2$.*

Nous allons maintenant donner une sélection de quelques résultats qui découlent immédiatement du théorème spectral. Nous verrons de multiples autres conséquences plus tard. Le premier est l'équivalence manquante du corollaire 2.41.

Corollaire 4.9 (Localisation du spectre). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. On a $\sigma(A) \subset [\alpha, +\infty[$ si et seulement si $\langle v, Av \rangle \geq \alpha \|v\|^2$ pour tout $v \in D(A)$.*

Démonstration. L'équivalence suit immédiatement du théorème spectral. Dire que $\sigma(A) = \text{ImEss}(a) \subset [\alpha, +\infty[$ signifie que $a \geq \alpha$ μ -presque partout, ce qui est équivalent à dire que $\int_B (a - \alpha)|f|^2 d\mu \geq 0$ pour tout $f \in L^2(B, d\mu)$. \square

Nous déterminons maintenant la norme de la résolvante $(A - z)^{-1}$ pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$. Nous avons déjà vu et largement utilisé que

$$\|(A - z)^{-1}\| \leq \frac{1}{|\Im(z)|}$$

lorsque $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ et que A est symétrique. Avec le théorème spectral nous pouvons maintenant calculer la valeur exacte de la norme en question.

Corollaire 4.10 (Norme de $(A - z)^{-1}$). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$, nous avons*

$$\boxed{\|(A - z)^{-1}\| = \frac{1}{\mathrm{d}(z, \sigma(A))}} \quad (4.4)$$

(la distance de z au fermé $\sigma(A)$ dans le plan complexe).

Démonstration. À une isométrie près on peut supposer que $A = M_a$ est un opérateur de multiplication sur $\mathfrak{H} = L^2(B, d\mu)$. Alors, par le théorème 4.4, on a

$$\|(A - z)^{-1}\| = \|(a - z)^{-1}\|_{L^\infty(B, d\mu)} = \frac{1}{\mathrm{Inf\,Ess}|a - z|}$$

où

$$\mathrm{Inf\,Ess}|a - z| = \min \left\{ y \geq 0 : \mu(\{|a - z| \leq (1 + \varepsilon)y\}) > 0, \forall \varepsilon > 0 \right\}$$

est égal à la distance de z à l'ensemble $\mathrm{Im\,Ess}(a) = \sigma(A)$. \square

Voici un dernier corollaire du théorème spectral.

Corollaire 4.11 (Tout point isolé du spectre est une valeur propre). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur le domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Si $\lambda \in \sigma(A)$ est un point isolé du spectre (c'est-à-dire $[\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon] \cap \sigma(A) = \{\lambda\}$ pour $\varepsilon > 0$ assez petit), alors λ est une valeur propre de A .*

Démonstration. Nous avons vu que dans la représentation où A devient l'opérateur de multiplication par $(s, n) \mapsto s$, nous avons nécessairement $\mu([\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon] \times \mathbb{N}) > 0$ pour tout $\varepsilon > 0$. Comme μ est supportée sur $\sigma(A) \times \mathbb{N}$, ceci implique alors $\mu(\{\lambda\} \times \mathbb{N}) > 0$, donc que λ est une valeur propre car $\{\lambda\} \times \mathbb{N} = a^{-1}(\{\lambda\})$. \square

Remarque 4.12 (Mesure spectrale). *Lorsque $B = \sigma(A) \times \mathbb{N}$ et $a(s, n) = s$, nous pouvons définir la mesure spectrale $\mu_{A,v}$ associée à l'opérateur A et à l'état normalisé $v \in D(A)$, que nous avons évoquée lors de la présentation du formalisme abstrait de la mécanique quantique à la section 1.6, par*

$$d\mu_{A,v}(s) = \sum_{n \in \mathbb{N}} |Uv(s, n)|^2 d\mu(s, n)$$

ce qui signifie plus précisément que

$$\int_{\mathbb{R}} \varphi(s) d\mu_{A,v}(s) = \int_B \varphi(s) |Uv(s, n)|^2 d\mu(s, n).$$

C'est la projection sur l'axe réel de la mesure de probabilité $|Uv(s, n)|^2 d\mu(s, n)$, qui est bien sûr telle que

$$\int_{\mathbb{R}} d\mu_{A,v}(s) = \|v\|^2 = 1, \quad \int_{\mathbb{R}} s d\mu_{A,v}(s) = \langle v, Av \rangle.$$

Il est possible de définir cette mesure dans une représentation quelconque dans laquelle A est un opérateur de multiplication (et la mesure obtenue ne dépend bien sûr pas de la représentation choisie). Nous en reparlerons à la section 4.4.

4.3 Calcul fonctionnel

Nous utilisons maintenant le théorème spectral pour définir $f(A)$ pour toute une classe de fonctions f .

Considérons une représentation quelconque où l'opérateur A devient l'opérateur de multiplication par la fonction $a \in L_{\text{loc}}^{\infty}(B, d\mu)$. Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ une fonction mesurable qui est localement bornée. Nous pouvons définir l'opérateur $f(A)$ en demandant que ce soit l'opérateur de multiplication par la fonction $f(a)$ dans la représentation où A a été diagonalisé :

$$\boxed{f(A) := U^* M_{f(a)} U, \quad D(f(A)) = U^* D(M_{f(a)})}. \quad (4.5)$$

Rappelons que M_a et son domaine ont été définis à la section 4.1. L'hypothèse que f est localement bornée sert à assurer que $f(a)$ est aussi localement bornée (puisque a l'est), de sorte que $M_{f(a)}$ soit bien définie. L'opérateur $f(A)$ est inchangé lorsque nous modifions f sur un ensemble de μ -mesure nulle, mais pas forcément sur un ensemble de mesure de Lebesgue nulle, car la mesure μ n'est pas nécessairement absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue. En fait la mesure de Lebesgue ne joue aucun rôle particulier dans cette théorie. Par ailleurs nous ne pouvons pas travailler avec des fonctions définies μ -presque partout, car nous ne connaissons pas la mesure μ ! Le plus simple est donc de conserver la définition pour toute fonction mesurable f . Une autre observation est que $f(A) = 0$ si f a son support en dehors de $\sigma(A) = \text{ImEss}(a)$.

Si f est réelle, alors l'opérateur $f(A)$ ainsi défini est auto-adjoint sur son domaine $D(f(A))$, par le théorème 4.4. Si f est une fonction bornée sur $\sigma(A)$ (réelle ou pas), alors $f(A)$ est un opérateur borné et par ailleurs $\|f(A)\| = \|f(a)\|_{L^{\infty}(B, d\mu)}$.

Comme il n'y a pas une unique manière de représenter A comme un opérateur de multiplication, il faut vérifier que la définition (4.5) ne dépend pas de la représentation choisie. L'idée est de commencer par vérifier que $f(A)$ vaut ce à quoi on s'attend pour une bonne classe de fonctions f , quelle que soit la représentation choisie, puis à conclure par densité. Pour un opérateur borné, nous pouvons par exemple regarder les puissances A^k qui correspondent à $f(x) = x^k$ ou plus généralement tous les polynômes $f(x) = P(x)$. Pour traiter le cas où A n'est pas forcément borné, il est naturel de commencer par étudier la résolvante $(A - z)^{-1}$ pour tout $z \notin \sigma(A)$, qui correspond à la fonction bornée $f(x) = (x - z)^{-1}$.

Le théorème suivant fournit, entre autre, l'unicité de $f(A)$ pour tout

f mesurable bornée sur tout \mathbb{R} , donc en particulier le caractère non ambiguë de notre définition (4.5) lorsqu'on change de représentation de A comme opérateur de multiplication. Nous commençons par nous restreindre ici aux fonctions mesurables bornées car ceci évite les discussions de domaine (pour ces fonctions $D(f(A)) = \mathfrak{H}$) et, de plus, ces dernières ont le bon goût de former une $*$ -algèbre de Banach commutative.

Théorème 4.13 (Calcul fonctionnel mesurable borné). *Soit A un opérateur auto-adjoint. Il existe une unique application*

$$f \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \mapsto f(A) \in B(\mathfrak{H})$$

définie sur l'algèbre $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ des fonctions boréliennes bornées sur tout \mathbb{R} , à valeurs dans l'algèbre $B(\mathfrak{H})$ des opérateurs bornés sur \mathfrak{H} , telle que

- (i) *c'est un morphisme de $*$ -algèbres, c'est-à-dire $(f + \alpha g)(A) = f(A) + \alpha g(A)$, $(fg)(A) = f(A)g(A)$, $\mathbf{1}(A) = \mathbf{1}_{\mathfrak{H}}$ et $\overline{f}(A) = f(A)^*$;*
- (ii) *qui est continu, c'est-à-dire $\|f(A)\| \leq \sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)|$;*
- (iii) *si $f(x) = (x - z)^{-1}$ avec $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, alors $f(A) = (A - z)^{-1}$;*
- (iv) *si f a son support dans $\mathbb{R} \setminus \sigma(A)$, alors $f(A) = 0$;*
- (v) *si $|f_n(x)| \leq C$ et $f_n(x) \rightarrow f(x)$ pour tout $x \in \mathbb{R}$, alors $f_n(A)v \rightarrow f(A)v$ pour tout $v \in \mathfrak{H}$.*

Remarque 4.14. *La propriété (v) du théorème 4.13 fournit une sorte de théorème de convergence dominée. Il est usuel de remplacer (v) par la convergence monotone, qui est une hypothèse plus faible.*

Notre définition (4.5) satisfait toutes les hypothèses requises, quelle que soit la représentation choisie, ce qui fournit l'existence du théorème. C'est l'unicité qui nous intéresse ici, et elle implique que la définition (4.5) ne dépend pas de la représentation choisie pour A en tant qu'opérateur de multiplication, du moins lorsque f est bornée.

L'énoncé du théorème 4.13 peut cependant paraître un peu surdimensionné s'il s'agit juste de prouver l'indépendance en question. Le point important est que, en fait, le théorème 4.13 est équivalent au théorème spectral 4.5 ! Il est même usuel de d'abord construire le calcul fonctionnel (il suffit de le faire pour des fonctions f continues, comme nous le verrons) pour en déduire que A est unitairement équivalent à un opérateur de multiplication. Avec ce point de vue, c'est alors l'existence qui devient plus difficile à montrer... Nous y reviendrons à la section 4.4 qui contient la preuve couplée des deux théorèmes 4.5 et 4.13.

Nous allons maintenant discuter de l'extension au cas de fonctions mesurables qui sont seulement *localement* bornées, ce qui implique de travailler sur les domaines qui dépendent de f . Nous avons déjà donné une définition

de $f(A)$ en (4.5) mais il faut vérifier que cette dernière ne dépend pas de la représentation choisie. Il y a plusieurs manières de procéder.

Une première façon est de remplacer f par une fonction bornée, par exemple $f_n = f\mathbf{1}(|f| \leq n)$ puis de passer à la limite. Rappelons que le domaine maximal de l'opérateur $M_{f(a)}$ de multiplication par la fonction $f(a)$ sur $L^2(B, d\mu)$ est donné par

$$D(M_{f(a)}) = \left\{ v \in L^2(B, d\mu) : \int_B |f(a(x))|^2 |v(x)|^2 d\mu(x) < \infty \right\}.$$

Or, pour $f_n = f\mathbf{1}(|f| \leq n)$, nous avons l'équivalence

$$v \in D(M_{f(a)}) \iff \limsup_{n \rightarrow \infty} \|f_n(a)v\|^2 = \limsup_{n \rightarrow \infty} \int_B |f_n(a(x))|^2 |v(x)|^2 d\mu(x) < \infty \quad (4.6)$$

et dans ce cas $f(a)v = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(a)v$ dans $L^2(B, d\mu)$. En effet, si $v \in D(M_{f(a)})$ l'intégrale à droite de (4.6) converge vers $\int_B |f(a(x))|^2 |v(x)|^2 d\mu(x)$ par convergence monotone, et $f_n(a)v \rightarrow f(a)v$ fortement dans $L^2(B, d\mu)$. Réciproquement, par le théorème de Fatou nous avons

$$\int_B |f(a(x))|^2 |v(x)|^2 d\mu(x) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \int_B |f_n(a(x))|^2 |v(x)|^2 d\mu(x)$$

qui est donc fini quand le terme de droite reste borné. Ceci permet de caractériser $f(A)$ et son domaine maximal par des propriétés faisant uniquement intervenir $f_n(A)$, de la façon suivante :

$$\begin{cases} v \in D(f(A)) \iff \limsup_{n \rightarrow \infty} \|f_n(A)v\| < \infty, \\ f(A)v = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(A)v. \end{cases} \quad (4.7)$$

En particulier, on trouve que la définition (4.5) est indépendante du choix de la représentation de A comme un opérateur de multiplication.

Une autre façon de procéder, assez similaire, est de commencer par définir $f(A)$ sur un domaine particulier indépendant de f et de fermer l'opérateur correspondant.

Définition 4.15. On dit que $v \in \mathfrak{H}$ est un vecteur à support A -compact s'il existe un intervalle borné $I \subset \mathbb{R}$ tel que $v = \mathbf{1}_I(A)v$. On appelle

$$\mathcal{D}_c(A) = \{v : \exists I \subset \mathbb{R} \text{ intervalle borné tel que } v = \mathbf{1}_I(A)v\} \quad (4.8)$$

l'espace de tous les vecteurs à support A -compact, qui est inclus dans $D(A)$ et est dense dans \mathfrak{H} .

L'espace $\mathcal{D}_c(A) \subset D(A)$ est invariant par A et, de plus, A est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{D}_c(A)$.

Lemme 4.16. *La restriction A^{\min} de l'opérateur A au domaine $D(A^{\min}) = \mathcal{D}_c(A)$ est essentiellement auto-adjointe et sa fermeture est $\overline{A^{\min}} = A$.*

Démonstration. Dans la représentation où A devient l'opérateur de multiplication $(s, n) \mapsto s$, A^{\min} est le même opérateur de multiplication, restreint à l'espace des fonctions à support sous la forme $I \times \mathbb{N}$. L'opérateur est essentiellement auto-adjoint sur ce domaine car il l'est sur l'espace plus petit des fonctions bornées à support compact, d'après le théorème 4.4. \square

Pour tout $v \in \mathcal{D}_c(A)$ et tout f borélienne localement bornée, nous pouvons définir

$$f(A)v := (f\mathbb{1}_I)(A)v, \quad \text{où } v = \mathbb{1}_I(A)v \quad (4.9)$$

qui fait sens puisque $f\mathbb{1}_I$ est bornée. Cette définition ne dépend pas de l'intervalle I choisi. Le résultat suivant est un corollaire immédiat du théorème spectral.

Corollaire 4.17 (Calcul fonctionnel mesurable non borné). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Pour toute fonction f mesurable sur \mathbb{R} localement bornée, l'opérateur $f(A)^{\min}$ défini sur $\mathcal{D}_c(A)$ par (4.9) est fermable et sa fermeture est l'opérateur $f(A)$ défini en (4.5). En particulier, elle ne dépend pas de la représentation choisie de A comme opérateur de multiplication. Si f est à valeurs réelles, $f(A)$ est auto-adjoint sur son domaine, c'est-à-dire $f(A)^{\min}$ est essentiellement auto-adjoint. Son spectre est $\sigma(f(A)) = f(\sigma(A))$.*

Remarque 4.18. *Il suit de la définition (4.5) que pour tout unitaire $U : \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}'$ entre deux espace de Hilbert éventuellement différents, on a l'égalité $Uf(A)U^* = f(UAU^*)$ sur le domaine $UD(f(A))$.*

En plus de la résolvante $(A - z)^{-1}$ obtenue pour $f(x) = (x - z)^{-1}$, dans la suite de ce chapitre nous verrons plusieurs opérateurs sous la forme $f(A)$ qui jouent un rôle important :

- les *projecteurs spectraux* sont les $\mathbb{1}_F(A)$ où F est un ensemble borélien quelconque de \mathbb{R} , et ils jouent le même rôle en dimension infinie que les projecteurs sur les sous-espaces propres des matrices hermitiennes — nous les avons déjà utilisés à la définition 4.15 ;
- le *propagateur de Schrödinger* est l'opérateur unitaire défini par e^{-itA} pour tout $t \in \mathbb{R}$ et il sert à résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps

$$i \frac{d}{dt} v(t) = Av(t) ;$$

- le *noyau de la chaleur* est l'opérateur e^{-tA} qui n'est borné que si le spectre de A est minoré, et il sert à résoudre l'équation de la chaleur.

$$\frac{d}{dt} v(t) = -Av(t).$$

Avant de passer à l'étude de ces opérateurs, nous discutons un peu du cas spécial des puissances $f(x) = x^k$.

Théorème 4.19 (Puissances). *Soit A un opérateur auto-adjoint et $k \geq 2$. L'opérateur A^k défini par (4.5) avec $f(x) = x^k$ a le domaine défini par récurrence*

$$D(A^k) = \left\{ v \in D(A^{k-1}) : A^{k-1}v \in D(A) \right\} \quad (4.10)$$

avec $A^k v = A(A^{k-1}v)$. L'opérateur A^k est auto-adjoint, de spectre $\{\lambda^k : \lambda \in \sigma(A)\}$.

Démonstration. Il s'agit juste de remarquer que

$$\int_B (1 + |a(x)|^{2k}) |v(x)|^2 d\mu(x)$$

converge si et seulement si $a^\ell v \in L^2(B, d\mu)$ pour tout $\ell = 0, \dots, k$. C'est la même preuve qui est utilisée en Fourier pour montrer que $H^2(\mathbb{R}^d) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^d) : \Delta f \in L^2(\mathbb{R}^d)\}$. \square

Exemple 4.20. *Considérons l'opérateur d'impulsion périodique P_{per} sur $]0, 1[$ étudié en détail à la section 2.8.1, dont le domaine vaut*

$$D(P_{\text{per}}) = \{f \in H^1(]0, 1[) : f(0) = f(1)\}.$$

Alors son carré est le Laplacien, mais il faut identifier laquelle des extensions auto-adjointes trouvée à la section 2.8.2. Sans surprise, on trouve

$$\begin{aligned} D(P_{\text{per}}^2) &= \{f \in H_{\text{per}}^1(]0, 1[) : f' \in H_{\text{per}}^1(]0, 1[)\} \\ &= H_{\text{per}}^2(]0, 1[) \\ &= \{f \in H^2(]0, 1[) : f(0) = f(1), f'(0) = f'(1)\}, \end{aligned}$$

avec bien sûr $P_{\text{per}}^2 f = -f''$.

Exemple 4.21 (Forme quadratique d'un opérateur auto-adjoint coercif). *Si l'opérateur auto-adjoint A a son spectre positif, nous pouvons également définir de façon unique la racine carrée de A en utilisant la fonction $f(x) = \sqrt{x}$. Un argument similaire au précédent implique alors que $A = \sqrt{A^2}$, et*

$$D(A) = \{f \in D(\sqrt{A}) : \sqrt{A}f \in D(\sqrt{A})\}.$$

Par le théorème spectral l'opérateur A est unitairement équivalent à un opérateur de multiplication par une fonction a sur un espace $L^2(B, d\mu)$, avec $a(x) \geq \alpha > 0$ pour μ -presque tout $x \in B$. Dans cette représentation, la forme quadratique de A devient

$$q_A(U^*v) = \int_B a(x) |v(x)|^2 d\mu(x)$$

de sorte que l'espace $Q(A)$, introduit à la section 3.2 vaut

$$\mathcal{Q}_A = U^* \left\{ v \in L^2(B, d\mu) : \int_B a(x)|v(x)|^2 d\mu(x) < \infty \right\} = D(\sqrt{A}),$$

le domaine de l'opérateur \sqrt{A} . Ainsi,

$$\boxed{\overline{q_A}(v) = \|\sqrt{A}v\|^2, \quad \forall v \in D(\sqrt{A}) = Q(A).}$$

4.4 Preuve du théorème spectral

Nous adoptons la démarche consistant à construire d'abord le calcul fonctionnel continu (une version plus faible du théorème 4.13) pour en déduire la diagonalisation des opérateurs auto-adjoints (théorème 4.5).

4.4.1 Construction du calcul fonctionnel continu

Nous allons fournir ici une preuve partielle du théorème 4.13, au sens où nous ne montrerons pas les propriétés pour toute la classe des fonctions mesurables bornées mais uniquement pour la classe des fonctions continues qui admettent des limites en $\pm\infty$:

$$C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R}) = \left\{ f \in C^0(\mathbb{R}) : \lim_{x \rightarrow +\infty} f(x) \text{ et } \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) \text{ existent et sont égales} \right\}.$$

Ceci est suffisant pour prouver le théorème spectral 4.5. Une fois ce dernier démontré, nous reviendrons ensuite à la preuve du théorème 4.13, pour laquelle il ne restera que l'unicité à prouver. S'il est plus classique de travailler dans $C_0^0(\mathbb{R})$ (l'algèbre des fonctions continues qui tendent vers 0 à l'infini), nous préférons y ajouter l'identité pour avoir une algèbre unitaire, et ainsi travailler dans $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R}) = \mathbb{C} + C_0^0(\mathbb{R})$. Nous montrons donc le théorème suivant.

Théorème 4.22 (Existence du calcul fonctionnel dans $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Il existe une unique application*

$$f \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R}) \mapsto f(A) \in B(\mathfrak{H})$$

qui soit un morphisme continu de $*$ -algèbres de Banach, c'est-à-dire telle que

- (i) $(f + \alpha g)(A) = f(A) + \alpha g(A)$, $(fg)(A) = f(A)g(A)$, $\mathbb{1}(A) = \mathbb{1}_{\mathfrak{H}}$ et $\overline{f(A)} = f(A)^*$;
- (ii) $\|f(A)\| \leq \|f\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$;
- (iii) si $f(x) = (x - z)^{-1}$ avec $z \notin \sigma(A)$, alors $f(A) = (A - z)^{-1}$.

Remarque 4.23. *Pour simplifier nous n'énonçons pas la propriété (iv) que $f(A) \equiv 0$ lorsque f a son support dans $\mathbb{R} \setminus \sigma(A)$ car cette dernière n'est pas nécessaire pour montrer le théorème spectral, et suivra ensuite immédiatement de ce dernier, comme nous le verrons*

Preuve du théorème 4.22. Considérons l'algèbre \mathcal{A} engendrée par l'identité et les $(x - z)^{-1}$ avec $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, c'est-à-dire celle composée des sommes finies de produits finis de telles fonctions. Le théorème de Stone-Weierstrass dans sa version locale (voir également l'exercice 4.55) implique que l'espace vectoriel engendré par l'identité et les $(x - z)^{-1}$ avec $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ est dense dans $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$ pour la norme $\|\cdot\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ et il en est donc de même pour l'algèbre \mathcal{A} . Par un argument de continuité, il suffit donc de démontrer l'existence du calcul fonctionnel sur \mathcal{A} , avec les propriétés (i)–(iii). L'unicité suit alors immédiatement de (iii) et de la densité des combinaisons linéaires des $(x - z)^{-1}$ et de l'identité. Nous en reparlerons aussi à la section 4.4.3.

La partie difficile de la preuve est en fait la continuité (ii), car il est assez clair comment $f(A)$ doit être défini pour f une combinaison linéaire finie de produits de $(x - z)^{-1}$, de sorte que (i) et (iii) soient vrais. Notons tout d'abord que pour tous $z, z' \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, les opérateurs $(A - z)^{-1}$ et $(A - z')^{-1}$ commutent :

$$(A - z)^{-1}(A - z')^{-1} = (A - z')^{-1}(A - z)^{-1}.$$

Pour le voir nous pouvons utiliser la formule de la résolvante

$$(A - z)^{-1} = (A - z')^{-1} + (z - z')(A - z)^{-1}(A - z')^{-1} \quad (4.11)$$

qui se démontre en multipliant à gauche par $A - z = A - z' + z - z'$ et qui implique

$$(A - z)^{-1}(A - z')^{-1} = (z - z')^{-1} \left((A - z)^{-1} - (A - z')^{-1} \right)$$

où le terme de droite est invariant quand on échange z et z' . Nous aurons aussi besoin du fait que l'adjoint de $(A - z)^{-1}$ est

$$\left[(A - z)^{-1} \right]^* = (A - \bar{z})^{-1} \quad (4.12)$$

ce qui suit de la relation

$$\langle f, (A - z)^{-1}g \rangle = \langle (A - \bar{z})(A - \bar{z})^{-1}f, (A - z)^{-1}g \rangle = \langle (A - \bar{z})^{-1}f, g \rangle$$

puisque A est symétrique et que $A - \bar{z}$ est inversible, pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Maintenant nous pouvons définir pour tout

$$f(x) = c + \sum_{j=1}^J \alpha_j \prod_{k=1}^{k_j} (x - z_{j,k})^{-1} \in \mathcal{A}$$

l'opérateur

$$f(A) = c + \sum_{j=1}^J \alpha_j \prod_{k=1}^{k_j} (A - z_{j,k})^{-1}.$$

L'ordre des opérateurs ne joue pas de rôle puisqu'ils commutent tous. Cette définition est bien sûr forcée par les propriétés (i) et (iii). L'ensemble de tous ces opérateurs forme une $*$ -algèbre abélienne d'opérateurs bornés

$$\mathcal{R} = \{f(A) : f \in \mathcal{A}\}$$

qui s'appelle *l'algèbre des résolvantes* et qui satisfait les hypothèses (i) et (iii) du théorème 4.22. La difficulté est maintenant de montrer la continuité (ii), ce qui va suivre du fait que \mathcal{A} est stable par la racine carrée et contient l'identité.

Lemme 4.24 (Stabilité de \mathcal{A} par racine carrée). *Soit $f \in \mathcal{A}$ une fonction qui est positive sur tout \mathbb{R} . Alors il existe $g \in \mathcal{A}$ telle que $f = |g|^2$.*

Preuve du lemme. En réduisant au même dénominateur, nous voyons que les fonctions $f \in \mathcal{A}$ peuvent toutes s'écrire sous la forme d'une fraction rationnelle réduite

$$f(x) = \frac{P(x)}{Q(x)}$$

où Q a toutes ses racines dans $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ et où $d^\circ(P) \leq d^\circ(Q)$. Réciproquement, par la décomposition en éléments simples, toute fraction rationnelle satisfaisant ces deux propriétés appartient à \mathcal{A} . Écrivons alors

$$P(x) = \prod_{\ell=1}^L (x - \alpha_\ell)^{p_\ell} \prod_{j=1}^J (x - z_j)^{q_j}, \quad Q(x) = \prod_{j=1}^{J'} (x - z'_j)^{q'_j}$$

où les $\alpha_\ell \in \mathbb{R}$ sont les racines réelles de P et les $z_j, z'_j \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ sont les racines non réelles de P et Q , respectivement. Nous voyons que f est à valeurs réelles sur \mathbb{R} si et seulement si $P/Q = \overline{P/Q}$ ou encore

$$\prod_{z_j \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}} (x - z_j)^{q_j} \prod_{j=1}^{J'} (x - \overline{z'_j})^{q'_j} = \prod_{z_j \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}} (x - \overline{z_j})^{q_j} \prod_{j=1}^{J'} (x - z'_j)^{q'_j}.$$

Comme $(x - z_j)^{q_j}$ divise le terme de gauche mais pas Q car la fraction est réduite, nous en déduisons que $\overline{z_j}$ est une racine de P de multiplicité au moins égale à q_j . En retournant l'argument, et en utilisant ensuite la même méthode pour Q , nous obtenons finalement que f est à valeurs réelles si et seulement si elle s'écrit sous la forme

$$f(x) = \prod_{\ell=1}^L (x - \alpha_\ell)^{p_\ell} \frac{\prod_{j=1}^J |x - z_j|^{2q_j}}{\prod_{j=1}^{J'} |x - z'_j|^{2q'_j}}.$$

Finalement, f est positive si et seulement si tous les p_ℓ sont pairs, ce qui signifie bien que $f = |g|^2$ avec

$$g(x) = \prod_{\ell=1}^L (x - \alpha_\ell)^{p_\ell/2} \frac{\prod_{j=1}^J (x - z_j)^{q_j}}{\prod_{j=1}^{J'} (x - z'_j)^{q'_j}}.$$

□

Le lemme permet de montrer la continuité. En effet, pour tout $f \in \mathcal{A}$, on a $0 \leq \|f\|_{L^\infty(\mathbb{R})}^2 - |f|^2 \in \mathcal{A}$, donc il existe $g \in \mathcal{A}$ telle que $\|f\|_{L^\infty(\mathbb{R})}^2 - |f|^2 = |g|^2$. Cela signifie que

$$f(A)^* f(A) = \|f\|_{L^\infty(\mathbb{R})}^2 - g(A)^* g(A)$$

et donc que pour tout $v \in \mathfrak{H}$

$$\|f(A)v\|^2 = \langle v, f(A)^* f(A)v \rangle = \|f\|_{L^\infty(\mathbb{R})}^2 \|v\|^2 - \|g(A)v\|^2 \leq \|f\|_{L^\infty(\mathbb{R})}^2 \|v\|^2.$$

Ainsi, $\|f(A)\| \leq \|f\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ comme il fallait démontrer. Ceci termine la preuve du théorème 4.22. □

4.4.2 Preuve du théorème spectral 4.5

Nous allons maintenant prouver le théorème spectral en utilisant le théorème 4.22, c'est-à-dire l'existence du calcul fonctionnel sur $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R}) = \mathbb{C} + C_0^0(\mathbb{R})$.

Soit v un vecteur normalisé quelconque de \mathfrak{H} et considérons la forme linéaire

$$\varphi_v(f) := \langle v, f(A)v \rangle$$

qui, par le théorème 4.22, est continue sur $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$. De plus, pour toute fonction $f \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$ positive, on a $f = |g|^2$ avec $g \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$, de sorte que

$$\varphi_v(f) := \langle v, g(A)^* g(A)v \rangle = \|g(A)v\|^2 \geq 0.$$

Par ailleurs nous avons également $\varphi_v(\mathbf{1}) = \|v\|^2 = 1$. Par le théorème de Riesz-Markov, ceci signifie qu'il existe une mesure de probabilité μ_v sur \mathbb{R} telle que

$$\varphi_v(f) = \langle v, f(A)v \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(s) d\mu_v(s)$$

pour tout $f \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$. La forme linéaire φ_v admet alors une unique extension à l'algèbre des fonctions mesurables bornées sur \mathbb{R} mais cette information n'est pas nécessaire pour la suite. En tous cas, il faut probablement retenir que l'espace $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$ ne joue pas un rôle particulier, c'est juste un intermédiaire utile pour la preuve.

Remarque 4.25. La mesure μ_v est la mesure spectrale associée au vecteur v et à l'opérateur A , que nous avons évoquée à la remarque 4.12 et à la section 1.6.

Nous pouvons montrer tout de suite que μ_v s'annule en dehors de $\sigma(A)$.

Lemme 4.26. Pour tout $v \in \mathfrak{H}$ normalisé, la mesure μ_v a son support dans $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

Preuve du lemme. Soit $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \sigma(A)$ et $z_n = \lambda + i/n$. L'opérateur $(A - z_n)^{-1}$ converge en norme vers l'opérateur borné $(A - \lambda)^{-1}$ (par exemple grâce au lemme 2.8). Or nous avons

$$\|(A - z_n)^{-1}v\|^2 = \langle v, (A - \bar{z}_n)^{-1}(A - z_n)^{-1}v \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{d\mu_v(s)}{(s - \lambda)^2 + n^{-2}}$$

et donc en passant à la limite

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{d\mu_v(s)}{(s - \lambda)^2} = \|(A - \lambda)^{-1}v\|^2 < \infty.$$

Ceci montre que l'intégrale de gauche converge. Si cette intégrale peut converger pour un λ particulier à condition que μ s'annule assez vite en ce point, elle ne peut converger pour tous les λ d'un intervalle que si μ s'annule sur tout cet intervalle (pour le voir, intégrer en λ en utilisant que $\mathbb{R} \setminus \sigma(A)$ est ouvert). Ceci termine la preuve que μ a son support dans $\sigma(A)$. \square

Comme μ_v est une mesure de probabilité, on a $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R}, d\mu_v) = L^2(\sigma(A), d\mu_v)$ et $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$ est même dense dans cet espace de Hilbert. Nous pouvons faire apparaître l'espace $L^2(\sigma(A), d\mu_v)$ très naturellement en étudiant la forme sesquilinéaire

$$\langle g(A)v, f(A)v \rangle = \langle v, (\bar{g}f)(A)v \rangle = \int_{\sigma(A)} \overline{g(s)}f(s)d\mu_v(s). \quad (4.13)$$

Cette égalité montre que l'application linéaire

$$f \mapsto f(A)v \quad (4.14)$$

est une isométrie de $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R}) \subset L^2(\sigma(A), d\mu)$ dans \mathfrak{H} . Ainsi, l'espace

$$\mathcal{X}_v := \overline{\{f(A)v, f \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})\}} \quad (4.15)$$

est isométrique à $L^2(\sigma(A), d\mu)$. Notons immédiatement que comme $(x - z)^{-1}f \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$ pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ et tout $f \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$, nous avons par continuité de $(A - z)^{-1}$ que

$$(A - z)^{-1}\mathcal{X}_v \subset \mathcal{X}_v$$

pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Un tel espace est appelé *invariant* (exercice 4.56). Une autre remarque importante pour la suite est que, même si $(A - z)^{-1}$ n'est pas auto-adjoint puisque z est complexe, $(A - z)^{-1}$ laisse également invariant $(\mathcal{X}_v)^\perp$, puisque si $w \in (\mathcal{X}_v)^\perp$

$$\langle f(A)v_k, (A - z)^{-1}w \rangle = \langle (A - \bar{z})^{-1}f(A)v_k, w \rangle = 0$$

pour tout $f \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$. Finalement, nous avons, avec $r_z(s) = (s - z)^{-1}$,

$$\langle g(A)v, (A - z)^{-1}f(A)v \rangle = \langle v, (\bar{g}r_z f)(A)v \rangle = \int_{\sigma(A)} \frac{\overline{g(s)}f(s)}{s - z} d\mu_v(s), \quad (4.16)$$

une relation qui s'étend à tout \mathcal{X}_v par continuité et signifie que, après avoir appliqué l'inverse de (4.14), l'opérateur $(A - z)^{-1}$ restreint au sous-espace invariant \mathcal{X}_v n'est rien d'autre que l'opérateur de multiplication par la fonction $s \mapsto (s - z)^{-1}$ dans $L^2(\sigma(A), d\mu_v)$.

La preuve du théorème est terminée si nous pouvons trouver un vecteur normalisé v de \mathfrak{H} tel que $\mathcal{X}_v = \mathfrak{H}$ (un tel vecteur v s'appelle un *vecteur cyclique*). En effet, dans ce cas nous avons montré que $(A - z)^{-1}$ est unitairement équivalent à l'opérateur de multiplication par $s \mapsto (s - z)^{-1}$ dans $L^2(\mathbb{R}, d\mu_v)$, ce qui implique que A est l'opérateur de multiplication par s dans cet espace. Nous pouvons donc prendre $d = 1$, $B = \sigma(A)$ et $\mu = \mu_v$. Sinon, nous devons itérer l'argument.

Lemme 4.27 (Décomposition en sous-espaces cycliques invariants). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Alors il existe une famille de vecteurs v_1, v_2, \dots (finie ou infinie) telle que*

$$\mathfrak{H} = \bigoplus_n \mathcal{X}_{v_n} \quad (4.17)$$

où les termes de la somme directe sont orthogonaux deux à deux.

Preuve du lemme. Prenons une base orthonormée (e_j) de \mathfrak{H} (toujours supposé séparable) et posons simplement $v_1 = e_1$. Si $\mathcal{X}_{v_1} \neq \mathfrak{H}$, considérons le plus petit $j \geq 2$ tel que $e_j \notin \mathcal{X}_{v_1}$. Nous prenons alors $v_2 = P_{\mathcal{X}_{v_1}}^\perp e_j$ (la projection orthogonale de e_j sur l'orthogonal de \mathcal{X}_{v_1}). Comme $v_2 \in (\mathcal{X}_{v_1})^\perp$, tout l'espace \mathcal{X}_{v_2} est orthogonal à \mathcal{X}_{v_1} . Pour le voir, il suffit de remarquer que

$$\langle f(A)v_1, g(A)v_2 \rangle = \langle (\bar{g}f)(A)v_1, v_2 \rangle = 0,$$

pour tout $f, g \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$, une relation qui persiste après fermeture. En itérant l'argument nous aurons soit écrit \mathfrak{H} comme une somme directe finie après un nombre fini d'étapes, soit construit une suite v_n telle que $\text{vect}(e_1, \dots, e_n) \subset \bigoplus_{k=1}^n \mathcal{X}_{v_k}$ pour tout n . Ceci montre bien (4.17). \square

Pour tout $z \notin \mathbb{R}$, chacun des espaces \mathcal{X}_{v_n} est invariant par $(A - z)^{-1}$, ainsi que son orthogonal. L'opérateur $(A - z)^{-1}$ est donc diagonal par blocs. Par ailleurs, $(A - z)^{-1}$ restreint à chacun de ces espaces est isométrique à l'opérateur de multiplication par la fonction $s \mapsto (s - z)^{-1}$ sur l'espace $L^2(\sigma(A), d\mu_{v_n})$. Nous pouvons mettre toutes ces informations ensemble en définissant la mesure μ sur $\sigma(A) \times \mathbb{N} \subset \mathbb{R}^2$ qui vaut μ_{v_n} sur chacun des $\sigma(A) \times \{n\}$ et l'isométrie appropriée sur tout \mathfrak{H} . S'il n'y a qu'un nombre fini de v_n , nous prenons simplement μ nul sur les autres copies de $\sigma(A)$. L'opérateur $(A - z)^{-1}$ est dans cette représentation l'opérateur de multiplication par la fonction $(s, n) \mapsto (s - z)^{-1}$, ce qui montre bien que A est unitairement équivalent à l'opérateur de multiplication par la fonction $(s, n) \mapsto s$, et termine la preuve du théorème spectral 4.5. \square

Exemple 4.28 (Impulsion et vecteurs cycliques). *Considérons l'opérateur $P = -id/dx$ qui est auto-adjoint sur $D(P) = H^1(\mathbb{R}) \subset \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R})$ et qui est diagonalisé par la transformée de Fourier. Un vecteur $v \in L^2(\mathbb{R})$ est cyclique pour P si et seulement si l'ensemble $\{k : \widehat{v}(k) = 0\}$ est de mesure de Lebesgue nulle, et on a alors en Fourier*

$$d\mu_v(k) = |\widehat{v}(k)|^2 dk.$$

L'unitaire (4.14), composé avec la transformée de Fourier, est l'application

$$u \in L^2(\mathbb{R}) \mapsto \frac{\widehat{u}(k)}{\widehat{v}(k)} \mathbb{1}_{\widehat{v}(k) \neq 0} \in L^2(\mathbb{R}, |\widehat{v}(k)|^2 dk)$$

4.4.3 Preuve du théorème 4.13 (calcul fonctionnel mesurable borné)

Nous avons déjà expliqué comment construire $f(A)$ pour toute fonction mesurable à l'aide du théorème spectral. Notre définition (4.5) satisfait toutes les propriétés (i)–(v) du théorème 4.13 (l'assertion (v) suit du théorème de convergence dominée). Il reste donc à montrer l'unicité (ce qui prouvera en particulier que notre définition (4.5) est bien indépendante de la représentation choisie).

Considérons donc une autre application $f \mapsto f(A)'$ vérifiant toutes les hypothèses du théorème. À cause du fait que pour $f(x) = (x - z)^{-1}$ on a $f(A)' = (A - z)^{-1}$ d'après (iii) et comme c'est un morphisme de $*$ -algèbres d'après (i), nous voyons que $f(A)' = f(A)$ pour tout $f \in \mathcal{A}$ (l'algèbre de la résolvante). Par densité de cette dernière et par la continuité (ii), ceci implique que $f(A) = f(A)'$ pour tout $f \in C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$. Considérons alors l'ensemble \mathcal{F} des f mesurables bornées telles que $f(A) = f(A)'$. À cause des propriétés (i)–(v), c'est une algèbre, qui contient $C_{\text{lim}}^0(\mathbb{R})$ et qui est stable par limite monotone, c'est-à-dire si $0 \leq f_n(x) \nearrow f(x)$ pour tout $x \in \mathbb{R}$ avec $f_n(A) = f_n(A)'$ alors on a $f_n(A)v = f_n(A')v$ et en passant à la limite on trouve d'après (v) que $f(A)v = f(A')v$ pour tout $v \in \mathfrak{H}$, donc que $f(A) = f(A)'$. Or il est connu que la plus petite algèbre contenant

$C_0^0(\mathbb{R})$ qui est stable par limite monotone est l'algèbre de toutes les fonctions mesurables bornées. Ceci montre finalement que $f(A) = f(A)'$ pour tout f .

Remarque 4.29. *La dernière assertion suit du lemme de classe monotone qui précise que toute classe d'ensembles boréliens stable par complémentaire et par limite monotone, et qui de plus contient tous les intervalles de \mathbb{R} , est nécessairement égale à la tribu de tous les boréliens. En effet, comme les fonctions indicatrices $\mathbb{1}_I$ d'intervalles de \mathbb{R} (ouverts ou fermés) sont des limites monotones de fonctions continues, nous avons nécessairement $\mathbb{1}_I(A) = \mathbb{1}_I(A)'$. Par ailleurs, l'ensemble des F boréliens tels que $\mathbb{1}_F(A)' = \mathbb{1}_F(A)$ est bien stable par complémentaire (car $\mathbb{1}_{F^c} = 1 - \mathbb{1}_F$) et par limite monotone d'après (v). Le lemme de classe monotone implique alors que $\mathbb{1}_F \in \mathcal{F}$ pour tout borélien F et il suit ensuite que toutes les fonctions mesurables bornées sont dans \mathcal{F} .*

4.5 Projections spectrales

Les projections spectrales généralisent les projecteurs sur les sous-espaces propres des matrices hermitiennes.

Définition 4.30 (Projections spectrales). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$. On appelle projections spectrales les opérateurs sous la forme $\mathbb{1}_F(A)$ où F est un borélien quelconque de \mathbb{R} . Le sous-espace spectral correspondant est l'image $\mathbb{1}_F(A)\mathfrak{H} = \text{Im}(\mathbb{1}_F(A))$.*

Le résultat suivant est une conséquence du théorème spectral 4.5 et du calcul fonctionnel du théorème 4.13.

Théorème 4.31 (Projections spectrales). *La famille des $(\mathbb{1}_F(A))_F$ satisfait les propriétés*

- (i) $\mathbb{1}_F(A) = \mathbb{1}_F(A)^* = (\mathbb{1}_F(A))^2$;
- (ii) $\mathbb{1}_\emptyset(A) = 0$, $\mathbb{1}_\mathbb{R}(A) = \mathbb{1}_\mathfrak{H}$;
- (iii) si $F = \cup_{n \geq 1} F_n$, alors $\mathbb{1}_F(A)v = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{1}_{\cup_{n=1}^N F_n} v$ pour tout $v \in \mathfrak{H}$;
- (iv) $\mathbb{1}_{F_1}(A)\mathbb{1}_{F_2}(A) = \mathbb{1}_{F_1 \cap F_2}(A)$.

De plus, le sous-espace spectral $\mathbb{1}_F(A)\mathfrak{H}$ est un sous-espace invariant de A , sur lequel A est borné lorsque F est borné.

Exemple 4.32 (Espaces propres). *Si $F = \{\lambda\}$ est réduit à un point, nous avons $\mathbb{1}_{\{\lambda\}}(A) = 0$ si λ n'est pas une valeur propre de A , c'est-à-dire $\ker(A - \lambda) = \{0\}$. Si λ est une valeur propre de A , $\mathbb{1}_{\{\lambda\}}(A)$ est le projecteur orthogonal sur $\ker(A - \lambda)$, qui est le sous-espace spectral correspondant.*

Pour un opérateur qui n'a pas de valeur propre (comme par exemple le Laplacien sur tout \mathbb{R}^d), les projecteurs $\mathbb{1}_{\{\lambda\}}(A)$ sont donc tous nuls et il est nécessaire de prendre F non réduit à un point. Par le calcul fonctionnel nous

voyons que l'image de $\mathbb{1}_{[a,b]}(A)$ contient des vecteurs $v \in D(A)$ qui vérifient tous, par exemple,

$$\|(A - a)v\| \leq (b - a) \|v\|.$$

Sur cet espace, $A\mathbb{1}_{[a,b]}$ est donc un opérateur borné.

De la même manière qu'il est possible de caractériser une mesure quelconque par sa fonction de partition $\lambda \mapsto \mu(]-\infty, \lambda])$, il est possible de caractériser un opérateur auto-adjoint à l'aide de la famille de ses projecteurs spectraux

$$P(\lambda) = \mathbb{1}_{]-\infty, \lambda]}(A).$$

C'est d'ailleurs l'une des versions équivalentes du théorème spectral.

Pour une matrice hermitienne M de taille $d \times d$, de valeurs propres ordonnées $\lambda_1 < \dots < \lambda_{d'}$ (éventuellement avec multiplicité, donc $d' \leq d$), l'opérateur $P(\lambda) := \mathbb{1}_{]-\infty, \lambda]}(M)$ est le projecteur orthogonal sur la somme directe des sous-espaces propres correspondant aux valeurs propres $\lambda_j \leq \lambda$. C'est une matrice $d \times d$ dont on peut calculer la dérivée au sens des distributions. Comme la fonction a des sauts aux valeurs propres et est constante entre deux λ_j distincts, nous voyons que

$$P'(\lambda) = \sum_{j=1}^d \delta_{\lambda_j}(\lambda) \mathbb{1}_{\{\lambda_j\}}(M).$$

En particulier, nous avons la représentation

$$M = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP(\lambda) \quad (4.18)$$

car $M = \sum_{j=1}^d \lambda_j \mathbb{1}_{\{\lambda_j\}}(M)$.

Il semble naturel de se demander s'il est possible d'écrire une formule similaire en dimension infinie pour un opérateur auto-adjoint quelconque. Soit donc A un opérateur auto-adjoint et fixons nous un vecteur $v \in \mathfrak{H}$. Alors la fonction

$$P_v(\lambda) := \langle v, \mathbb{1}_{]-\infty, \lambda]}(A)v \rangle$$

est bornée et croissante. Sa dérivée au sens des distributions est donc une mesure μ_v . C'est la mesure spectrale que nous avons déjà rencontrée auparavant (remarque 4.12) et qui est telle que

$$\langle v, f(A)v \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\mu_v(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\langle v, \mathbb{1}_{]-\infty, \lambda]}(A)v \rangle \quad (4.19)$$

pour tout f mesurable bornée, et

$$\boxed{\langle v, Av \rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_v(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\langle v, \mathbb{1}_{]-\infty, \lambda]}(A)v \rangle} \quad (4.20)$$

si de plus $v \in D(A)$. L'équation (4.20) est la version en dimension infinie de la résolution spectrale (4.18).

Réciproquement, il est possible de montrer que toute famille de projections satisfaisant les propriétés (i)–(iv) du théorème 4.31 est associée à un unique opérateur auto-adjoint A . En fait, plusieurs ouvrages (par exemple [Tes09]) commencent par construire les opérateurs $\mathbb{1}_{]-\infty, \lambda]}(A)$, pour ensuite en déduire le calcul fonctionnel via la formule (4.19) et finalement le théorème spectral. C'est une troisième version équivalente de la théorie.

Pour finir cette section, nous voulons mentionner deux formules très utiles pour le projecteur $\mathbb{1}_{[a,b]}(A)$.

Théorème 4.33 (Formule de Cauchy). *Soit A un opérateur auto-adjoint, $a, b \in \mathbb{R}$ et $\varepsilon > 0$ tels que*

$$\sigma(A) \cap [a - \varepsilon, a + \varepsilon] = \sigma(A) \cap [b - \varepsilon, b + \varepsilon] = \emptyset,$$

c'est-à-dire qu'il n'y a pas de spectre au voisinage de a et de b . Alors nous avons la formule

$$\mathbb{1}_{]a,b[}(A) = \mathbb{1}_{[a,b]}(A) = -\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} (A - z)^{-1} dz \quad (4.21)$$

pour tout lacet fermé \mathcal{C} dans le plan complexe, orienté dans le sens trigonométrique, qui entoure l'intervalle $[a, b]$ et croise l'axe réel en a et b (Figure 4.2).

Démonstration. Noter que l'intégrale à droite de (4.21) converge, puisque la résolvante est en norme majorée par l'inverse de la distance au spectre (d'après (4.4)) et que la courbe \mathcal{C} reste à une distance positive du spectre. Le résultat suit alors du théorème spectral et de la formule de Cauchy qui stipule que

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} (x - z)^{-1} dz \\ &= \begin{cases} -1 & \text{si le résidu } x \text{ est dans la région délimitée par la courbe,} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \end{aligned}$$

□

Nous avons vu au théorème 4.33 une formule qui permet d'exprimer les projecteurs spectraux en fonction des résolvantes, en utilisant un contour qui croise l'axe réel en deux points qui ne font pas partie du spectre. Cette formule ne permet pas d'obtenir $\mathbb{1}_{[a,b]}(A)$ si a et b sont dans le spectre de A , car l'intégrale sur le contour diverge au voisinage de a et b . Cependant, en choisissant un contour symétrique par rapport à l'axe réel et en l'aplatissant (Figure 4.3), on peut montrer une formule valable pour tout $a, b \in \mathbb{R}$.

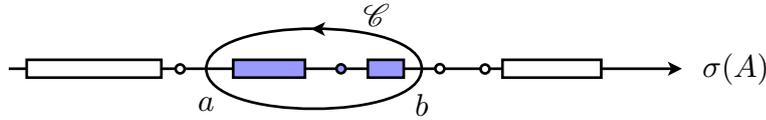


FIGURE 4.2 – La formule de Cauchy (4.21) permet d’exprimer un projecteur spectral comme l’intégrale de la résolvante $(A - z)^{-1}$ sur un contour dans le plan complexe.

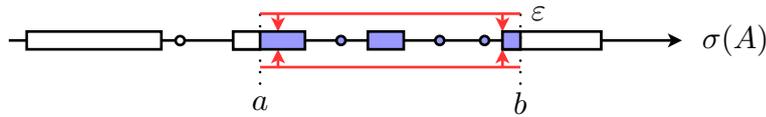


FIGURE 4.3 – La formule de Stone (4.22) permet d’exprimer un projecteur spectral comme l’intégrale de la résolvante $(A - z)^{-1}$ sur un contour qui s’aplatit dans le plan complexe, même avec $a, b \in \sigma(A)$.

Théorème 4.34 (Formule de Stone). *Soit A un opérateur auto-adjoint et $a \leq b \in \mathbb{R}$. Pour tout $v \in \mathfrak{H}$, on a*

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2i\pi} \int_a^b ((A - s - i\varepsilon)^{-1} - (A - s + i\varepsilon)^{-1}) ds v \\ = \left(\mathbb{1}_{]a,b[}(A) + \frac{1}{2} \mathbb{1}_{\{a\}}(A) + \frac{1}{2} \mathbb{1}_{\{b\}}(A) \right) v. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Démonstration. Considérons la fonction

$$\begin{aligned} f_\varepsilon(x) &= \frac{1}{2i\pi} \int_a^b \left(\frac{1}{x - s - i\varepsilon} - \frac{1}{x - s + i\varepsilon} \right) ds \\ &= \frac{\varepsilon}{\pi} \int_a^b \frac{ds}{(x - s)^2 + \varepsilon^2} \\ &= \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{b - x}{\varepsilon} \right) - \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{a - x}{\varepsilon} \right) \end{aligned}$$

qui est uniformément bornée et converge vers

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} f_\varepsilon(x) = \mathbb{1}_{]a,b[}(x) + \frac{1}{2} \mathbb{1}_{\{a\}}(x) + \frac{1}{2} \mathbb{1}_{\{b\}}(x)$$

pour tout $x \in \mathbb{R}$. Par la propriété (v) du théorème 4.13 sur le calcul fonctionnel, le résultat suit immédiatement. \square

4.6 Équations de Schrödinger, de la chaleur et des ondes

4.6.1 Équation de Schrödinger

Dans cette section nous montrons que l'équation de Schrödinger dépendant du temps

$$\begin{cases} i\partial_t v(t) = A v(t) \\ v(0) = v_0 \end{cases} \quad (4.23)$$

admet l'unique solution $v(t) = e^{-itA}v_0$, où e^{-itA} est défini par le calcul fonctionnel. Une première difficulté consiste à définir précisément le concept de solutions de (4.23). Ici, nous allons nous restreindre à des solutions qui sont dans $L^1(]0, T[, \mathfrak{H})$ et vérifient (4.23) au sens faible.

On dit que la famille $v(t)$ pour $t \in]0, T[$ appartient à $L^1(]0, T[, \mathfrak{H})$ lorsque

$$\int_0^T \|v(t)\| dt < \infty.$$

Il y a des subtilités concernant la définition du caractère mesurable de l'application $t \mapsto v(t)$ qui prend ses valeurs dans l'espace de Hilbert \mathfrak{H} . En fait nous pouvons définir la notion de mesurabilité en faisant intervenir la tribu des boréliens de \mathfrak{H} (on parle alors de mesurabilité forte), ou demander plutôt que les applications $t \mapsto \langle w, v(t) \rangle$ soient toutes mesurables, ce qui revient à projeter $v(t)$ sur une base (on parle de mesurabilité faible). Nous n'en dirons pas plus ici et renvoyons à [Eva10, App. E.5] pour quelques détails.

Soit A un opérateur auto-adjoint. Comme A est fermé, l'espace $D(A)$ est fermé lorsqu'il est muni de la norme du graphe

$$\|v\|_{D(A)} = \sqrt{\|v\|^2 + \|Av\|^2}.$$

En fait, $D(A)$ est même un espace de Hilbert lorsqu'il est muni du produit scalaire associé

$$\langle v, v' \rangle_{D(A)} = \langle v, v' \rangle + \langle Av, Av' \rangle.$$

Ceci permet de considérer le dual $D(A)'$ de $D(A)$, qui est aussi un espace de Hilbert. Par le théorème spectral, ce dual s'identifie à l'espace des fonctions $w \in L^2_{\text{loc}}(B, d\mu)$ telles que $w(1+|a|)^{-1} \in L^2(B, d\mu)$, car nous identifions toujours $\mathfrak{H} \simeq L^2(B, d\mu)$ avec son dual. Comme A est symétrique, tout vecteur $v \in \mathfrak{H}$ fournit une forme anti-linéaire sur $D(A)'$, donnée par

$$u \in D(A) \mapsto \langle Au, v \rangle,$$

et notée formellement Av . Cette dernière coïncide avec Av si $v \in D(A)$. Ceci permet d'identifier $A\mathfrak{H}$ à un sous-espace de $D(A)'$, avec

$$\|Av\|_{D(A)'} = \sup_{u \in D(A)} \frac{|\langle v, Au \rangle|}{\|u\|_{D(A)}} \leq \|v\|.$$

Ainsi, nous voyons que tout $v(t) \in L^1(]0, T[, \mathfrak{H})$ est tel que

$$Av(t) \in L^1(]0, T[, D(A)')$$

ce qui permet de donner un sens faible au terme de droite de l'équation (4.23), en tant que forme anti-linéaire sur $D(A)$. Il faut aussi donner un sens au terme de gauche $\partial_t v(t)$, que l'on veut interpréter comme la dérivée faible au sens des distributions de $v(t)$. Plutôt que de parler de dérivée faible, nous allons simplement prendre le produit scalaire contre un vecteur $w \in D(A)$ et parler de dérivée au sens des distributions de $\langle w, v(t) \rangle$, en utilisant la relation

$$\frac{d}{dt} \langle w, v(t) \rangle = \langle w, \partial_t v(t) \rangle.$$

Définition 4.35 (Solutions faibles de l'équation de Schrödinger). *On dit que $v \in L^1(]0, T[, \mathfrak{H})$ est une solution faible de l'équation de Schrödinger (4.23) si on a, au sens des distributions sur $]0, T[$,*

$$\frac{d}{dt} \langle w, v(t) \rangle = -i \langle Aw, v(t) \rangle \quad (4.24)$$

avec de plus

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \langle w, v(t) \rangle = \langle w, v_0 \rangle, \quad (4.25)$$

ceci pour tout $w \in D(A)$.

Notre hypothèse que $v \in L^1(]0, T[, \mathfrak{H})$ implique que

$$\varphi(t) = \langle w, v(t) \rangle \in L^1(]0, T[, \mathbb{C}).$$

De plus, l'équation (4.24) implique que $\varphi' \in L^1(]0, T[, \mathbb{C})$ ce qui, par les propriétés des espaces de Sobolev en dimension un (rappelées à la section A.2), montre que $\varphi \in C^0([0, T], \mathbb{C})$, c'est-à-dire que la limite à gauche de (4.25) existe. Bien sûr, il existe une définition similaire pour les solutions en temps négatif.

Remarque 4.36 (Dérivée faible à valeurs dans un espace de Banach). *L'équation (4.24) signifie que pour tout $\varphi \in C_c^\infty(]0, T[)$, on a*

$$-\left\langle w, \int_0^T \varphi'(t)v(t) dt \right\rangle = -i \left\langle Aw, \int_0^T \varphi(t)v(t) dt \right\rangle.$$

L'interversion de l'intégrale et du produit scalaire est justifié par le fait que $v \in L^1(]0, T[, \mathfrak{H})$. Cela signifie qu'on a l'égalité des formes anti-linéaires

$$-\int_0^T \varphi'(t)v(t) dt = -i \int_0^T \varphi(t) Av(t) dt \in D(A)', \quad (4.26)$$

pour tout $\varphi \in C_c^\infty(]0, T[)$. C'est la définition du fait que $v(t)$ possède une dérivée faible dans $D(A)'$, qui est égale à $-iAv(t)$. Ainsi, la formulation

faible (4.24) consiste juste à demander que l'égalité $\partial_t v = -iAv$ ait lieu dans $D(A)'$ où $\partial_t v$ est la dérivée définie par (4.26). Nous renvoyons par exemple à [Eva10, Sec. 5.9.2 & App. E.5] ou [DL88, Chap. XVIII § 1] pour plus de détails concernant les dérivées faibles à valeurs dans des espaces de Banach.

On se préoccupe fréquemment du caractère *bien posé* de l'équation, qui consiste à demander, en plus de l'existence et de l'unicité des solutions, que l'application

$$v_0 \mapsto v(t)$$

soit *continue* dans des espaces appropriés. Ceci signifie que la solution $v(t)$ ne changera qu'un peu lorsque la condition initiale v_0 est légèrement perturbée.

Théorème 4.37 (Existence, unicité et caractère bien posé pour l'équation de Schrödinger). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Alors pour tout $v_0 \in \mathfrak{H}$, l'équation (4.23) admet une unique solution faible, donnée par*

$$v(t) = e^{-itA}v_0.$$

Elle est définie sur tout \mathbb{R} et vérifie $v \in C^0(\mathbb{R}, \mathfrak{H})$, avec la relation

$$\|v(t)\| = \|v_0\|$$

pour tout $t \in \mathbb{R}$. En particulier l'équation est bien posée de \mathfrak{H} dans $C^0(\mathbb{R}, \mathfrak{H})$.

Si de plus $v \in D(A)$, alors $v \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{H}) \cap C^0(\mathbb{R}, D(A))$ et résout (4.23) au sens fort.

Remarque 4.38. *Il suit du calcul fonctionnel que $v(t) = e^{-itA}v_0 \in D(f(A))$ pour tout f tel que $v_0 \in D(f(A))$, avec $\langle v(t), f(A)v(t) \rangle = \langle v_0, f(A)v_0 \rangle$ pour tout $t \in \mathbb{R}$.*

Démonstration. Par le calcul fonctionnel, $v(t) = e^{-itA}v_0$ est bien une solution forte de l'équation si on ajoute l'hypothèse supplémentaire que $v_0 \in D(A)$. Supposons donc maintenant que $v_0 \in \mathfrak{H}$ sans nécessairement appartenir à $D(A)$. On trouve

$$\frac{d}{dt} \langle w, e^{-itA}v_0 \rangle = \frac{d}{dt} \langle e^{itA}w, v_0 \rangle = -i \langle e^{itA}Aw, v_0 \rangle = -i \langle Aw, v(t) \rangle$$

pour tout $w \in D(A)$ et tout $t \in \mathbb{R}$, qui signifie que $v(t)$ est une solution faible sur \mathbb{R} si $v_0 \in \mathfrak{H}$.

Il reste donc à montrer l'unicité. Nous allons utiliser le fait que si $v \in L^1([0, T[, \mathfrak{H})$ est une solution faible de l'équation, alors on a pour tout $w \in C^1([0, T], \mathfrak{H}) \cap C^0([0, T], D(A))$

$$\frac{d}{dt} \langle w(t), v(t) \rangle = -i \langle Aw(t), v(t) \rangle + \langle \partial_t w(t), v(t) \rangle. \quad (4.27)$$

En d'autres termes, nous pouvons prendre w dépendant du temps dans (4.24) à condition de bien sûr penser à dériver w . Nous laissons la preuve de (4.27) en exercice.

Soit alors $v_0 \in \mathfrak{H}$ et $v(t)$ une solution faible quelconque sur $]0, T[$. Soit aussi $w_0 \in D(A)$ et $w(t) = e^{-itA}w_0$, ce dernier étant une solution forte de l'équation, avec $w(t) \in D(A)$ pour tout t . Nous obtenons donc

$$\frac{d}{dt} \langle w(t), v(t) \rangle = -i \langle Aw(t), v(t) \rangle + i \langle Aw(t), v(t) \rangle = 0.$$

Comme $\varphi(t) := \langle w(t), v(t) \rangle$ est continue sur $[0, T]$ (car intégrable et de dérivée intégrable), ceci montre que

$$\langle w(t), v(t) \rangle = \langle w_0, e^{itA}v(t) \rangle = \langle w_0, v_0 \rangle$$

qui est la limite en 0 de cette même quantité. Comme nous avons cette relation pour tout $t \in \mathbb{R}$ et tout $w_0 \in D(A)$, on en déduit par densité de $D(A)$ que $e^{itA}v(t) = v_0$ pour presque tout $t \in \mathbb{R}$, c'est-à-dire $v(t) = e^{-itA}v_0$. \square

Exemple 4.39 (Laplacien). Pour $A = -\Delta$ sur $D(A) = H^2(\mathbb{R}^d) \subset \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, l'opérateur e^{-itA} est la multiplication par la fonction $e^{-it|k|^2}$ en Fourier et on obtient

$$(e^{-itA}v_0)(x) = \frac{1}{(4\pi it)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} v_0(y) dy,$$

une formule qui fait sens par exemple pour $v_0 \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^2(\mathbb{R}^d)$.

Remarque 4.40 (Attention aux séries). La formule $v(t) = e^{-itA}v_0$ de l'unique solution de l'équation de Schrödinger brille par sa simplicité, mais il est important de garder à l'esprit que l'unitaire e^{-itA} a été défini par le calcul fonctionnel (théorème 4.13), qui n'est pas un résultat trivial. Par exemple, on pourrait penser que l'on peut écrire la solution sous la forme

$$v(t) = e^{-itA}v_0 = \sum_{n \geq 0} \frac{(-it)^n}{n!} A^n v_0 \quad (4.28)$$

mais cette formule ne fait vraiment sens que si $v \in D(A^n)$ pour tout $n \geq 1$ et que la série converge. Une mauvaise utilisation de (4.28) peut conduire à de fausses conclusions.

Voici un exemple tiré de [MTWB10, FLLØS16]. Considérons la fonction $v_0 = e^{-|x|} \in \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R})$ et l'opérateur $A = -d^2/dx^2$ qui est auto-adjoint sur $D(A) = H^2(\mathbb{R})$. Un calcul montre que

$$-v_0'' + v_0 = 2\delta_0 \quad (4.29)$$

au sens des distributions sur \mathbb{R} . Ainsi, nous avons $-v_0'' + v_0 = 0$ sur $\mathbb{R} \setminus \{0\}$. Le terme de droite de la formule (4.28) semble donc fournir

$$\sum_{n \geq 0} \frac{(it)^n}{n!} v_0^{(2n)} = v_0 \sum_{n \geq 0} \frac{(it)^n}{n!} = e^{it} v_0, \quad \text{sur } \mathbb{R} \setminus \{0\}.$$

Ceci ne peut être égal à $e^{-itA} v_0$ car sinon v_0 serait un vecteur propre de $A = -d^2/dx^2$, de valeur propre -1 , et on sait que $\sigma(A) = [0, \infty[$ sans aucune valeur propre. En fait $v_0(x) = e^{-|x|}$ n'appartient pas à $H^2(\mathbb{R}) = D(A)$ puisqu'on a (4.29), ce qui rend illicite l'utilisation de la série (4.28), même en dehors de l'origine.

Exercice 4.41. Montrer que $v(t) = e^{-itA} v_0$ est dérivable k fois en $t = 0$ dans \mathfrak{H} (donc pour tout $t \in \mathbb{R}$), si et seulement si $v_0 \in D(A^k)$, et que alors $v^{(k)}(0) = (-i)^k A^k v_0$. Donner une condition sur v_0 pour que la série (4.28) converge et coïncide bien avec $v(t)$.

4.6.2 Équation de la chaleur

L'étude réalisée pour l'équation de Schrödinger peut s'étendre à d'autres situations. Par exemple, l'équation de la chaleur prend la forme

$$\begin{cases} \partial_t v(t) = -A v(t) \\ v(0) = v_0 \end{cases} \quad (4.30)$$

et peut être étudiée avec exactement la même méthode que précédemment. Une différence est que la solution est maintenant

$$v(t) = e^{-tA} v_0$$

qui ne fait sens en temps positif que s'il existe $T > 0$ tel que $v_0 \in D(e^{-TA})$. Ainsi, le problème n'est bien posé sur \mathfrak{H} en temps positif que si e^{-TA} est un opérateur borné, c'est-à-dire A a son spectre qui est minoré. Le problème n'est bien posé sur \mathbb{R} que si A est un opérateur borné. Nous énonçons ici un théorème qui se montre de la même façon que celui pour l'équation de Schrödinger, dans le cas des temps positifs uniquement. Les solutions faibles sont définies de façon similaire à la définition 4.35 en demandant bien sûr que

$$\frac{d}{dt} \langle w, v(t) \rangle = -\langle Aw, v(t) \rangle.$$

Théorème 4.42 (Existence, unicité et caractère bien posé pour l'équation de la chaleur). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, dont le spectre est minoré. Alors pour tout $v_0 \in \mathfrak{H}$, l'équation (4.30) admet une unique solution faible sur $]0, T[$, donnée par*

$$v(t) = e^{-tA} v_0.$$

Elle vérifie $v \in C^0(\mathbb{R}, \mathfrak{H})$, avec la relation

$$\|v(t)\| \leq e^{-t \min \sigma(A)} \|v_0\|$$

pour tout $t \in \mathbb{R}$. En particulier l'équation est bien posée de \mathfrak{H} dans $C^0([0, +\infty[, \mathfrak{H})$.

Si de plus $v \in D(A)$, alors $v \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{H}) \cap C^0(\mathbb{R}, D(A))$ et vérifie (4.23) au sens fort.

Remarque 4.43. Pour l'équation de Schrödinger nous avons vu que $v_0 \in D(f(A))$ implique $v(t) \in D(f(A))$ pour tout $t \in \mathbb{R}$. En fait, $v(t) \in D(f(A))$ pour un t si et seulement si $v_0 \in D(f(A))$ car on peut appliquer le flot en sens inverse. En d'autres termes, l'équation de Schrödinger propage la "régularité par rapport à A " de la condition initiale sans jamais l'améliorer.

La situation est très différente pour l'équation de la chaleur pour laquelle on a $v(t) \in D(e^{tA})$ pour tout $t > 0$, donc en particulier $v(t) \in D(A^k)$ pour tout $k \geq 1$, même si cette propriété est fautive en $t = 0$.

Exemple 4.44 (Laplacien). Pour $A = -\Delta$ sur $D(A) = H^2(\mathbb{R}^d) \subset \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, l'opérateur e^{-tA} est la multiplication par la fonction $e^{-t|k|^2}$ en Fourier et on obtient

$$(e^{-tA}v_0)(x) = \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} v_0(y) dy$$

dont on vérifie qu'elle est de classe C^∞ pour tout $t > 0$, même si v_0 est juste une fonction de $L^2(\mathbb{R}^d)$.

4.6.3 Équation des ondes

Parmi de multiples autres équations intéressantes, nous mentionnons aussi l'équation des ondes

$$\begin{cases} \partial_{tt}v(t) = -Av(t) \\ v(0) = v_0 \\ \partial_t v(0) = v_1 \end{cases} \quad (4.31)$$

qui requiert une formulation faible sous la forme

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} \langle w, v(t) \rangle = -\langle Aw, v(t) \rangle \\ \lim_{t \rightarrow 0^+} \langle w, v(t) \rangle = \langle w, v_0 \rangle \\ \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{d}{dt} \langle w, v(t) \rangle = \langle w, v_1 \rangle, \end{cases}$$

car maintenant la fonction $\varphi(t) = \langle w, v(t) \rangle$ a deux dérivées intégrables sur $]0, T[$, donc est $C^1([0, T], \mathbb{C})$. L'unique solution s'écrit sous la forme

$$v(t) = \cos(t\sqrt{A})v_0 + \frac{\sin(t\sqrt{A})}{\sqrt{A}}v_1,$$

et nécessite que $\sigma(A) \subset \mathbb{R}^+$. Le problème est alors bien posé sur \mathbb{R} .

4.7 Théorème de Stone et groupes de symétrie

4.7.1 Théorème de Stone

Nous avons vu à la section 4.6 l'importance de l'unitaire $U(t) = e^{-itA}$ pour tout opérateur auto-adjoint, qui permet de résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Dans cette section nous montrons que, réciproquement, toute famille d'unitaires $(U(t))_{t \in \mathbb{R}}$ formant un groupe à un paramètre fortement continu, est nécessairement sous la forme $U(t) = e^{-itA}$. C'est le célèbre théorème de Stone.

Théorème 4.45 (Stone). *Soit $(U(t))_{t \in \mathbb{R}}$ une famille d'opérateurs sur un espace de Hilbert \mathfrak{H} vérifiant*

- (i) $U(t+s) = U(t)U(s) = U(s)U(t)$ pour tous $t, s \in \mathbb{R}$,
- (ii) $U(-t) = U(t)^*$ pour tout $t \in \mathbb{R}$,
- (iii) $U(0) = \mathbb{1}_{\mathfrak{H}}$,
- (iv) $t \mapsto U(t)$ est fortement continue en 0 : on a $U(t)v \rightarrow v$ dans \mathfrak{H} quand $t \rightarrow 0$, pour tout $v \in \mathfrak{H}$ fixé.

Alors il existe un unique opérateur auto-adjoint $(A, D(A))$ tel que $U(t) = e^{-itA}$ pour tout $t \in \mathbb{R}$, appelé le générateur infinitésimal de $U(t)$.

De plus, s'il existe un domaine dense $\mathcal{D} \subset \mathfrak{H}$ invariant par tous les $U(t)$, tel que $t \mapsto U(t)v$ soit différentiable en $t = 0$ pour tout $v \in \mathcal{D}$, alors $\mathcal{D} \subset D(A)$,

$$\frac{d}{dt}U(t)v|_{t=0} = -iAv \quad (4.32)$$

et la restriction A^{\min} de A au domaine $D(A^{\min}) = \mathcal{D}$ est essentiellement auto-adjointe, avec $\overline{A^{\min}} = A$.

Remarque 4.46. *La continuité forte en 0 dans (iv) et la dérivabilité en 0 dans (4.32) sont équivalentes à la même propriété en tout $t_0 \in \mathbb{R}$, puisque $U(t+t_0) = U(t)U(t_0)$ par (i).*

Nous donnons maintenant la preuve du théorème.

Démonstration. Nous commençons par construire un domaine \mathcal{D} sur lequel $U(t)$ est différentiable, ce qui nous permettra d'introduire $B := iU'(0)$ sur $D(B) = \mathcal{D}$. Ensuite nous montrerons que B est symétrique et essentiellement auto-adjoint, ainsi l'opérateur de l'énoncé sera $A = \overline{B}$. L'idée principale de la preuve est basée sur la remarque que

$$\int_{\mathbb{R}} f(t)e^{-iAt} dt = \sqrt{2\pi}\widehat{f}(A)$$

ce qui permet de retrouver $\widehat{f}(A)$ pour tout f intégrable. Nous introduisons donc l'espace

$$\mathcal{D} := \left\{ \int_{\mathbb{R}} f(t)U(t)v dt, \quad f \in C_c^\infty(\mathbb{R}), v \in \mathfrak{H} \right\}. \quad (4.33)$$

Ici l'intégrale est convergente dans \mathfrak{H} puisque

$$\int_{\mathbb{R}} \|f(t)U(t)v\| dt = \|v\| \int_{\mathbb{R}} |f(t)| dt.$$

Soit $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ à support dans $[-1, 1]$ et telle que $\int_{\mathbb{R}} \chi = 1$. Comme

$$\left\| n \int_{\mathbb{R}} \chi(nt)U(t)v dt - v \right\| \leq \int_{-1}^1 \chi(t) \|U(t/n)v - v\| dt \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0$$

pour tout $v \in \mathfrak{H}$, on conclut que \mathcal{D} est dense. Par ailleurs,

$$U(s) \int_{\mathbb{R}} f(t)U(t)v dt = \int_{\mathbb{R}} f(t)U(t+s)v dt = \int_{\mathbb{R}} f(t-s)U(t)v dt \quad (4.34)$$

de sorte que

$$\begin{aligned} \frac{U(s) - 1}{s} \int_{\mathbb{R}} f(t)U(t)v dt &= \int_{\mathbb{R}} \frac{f(t-s) - f(t)}{s} U(t)v dt \\ &\xrightarrow[s \rightarrow 0]{} - \int_{\mathbb{R}} f'(t)U(t)v dt, \end{aligned}$$

ce qui montre que $t \mapsto U(t)$ est dérivable sur le domaine dense \mathcal{D} en $t = 0$. Par ailleurs, \mathcal{D} est invariant par tous les $U(t)$, d'après (4.34).

Afin de montrer en même temps la seconde partie du théorème, considérons maintenant un domaine dense \mathcal{D} quelconque (pas forcément celui introduit précédemment), invariant par tous les $U(t)$ et sur lequel U est dérivable en $t = 0$. Montrons alors que $B = iU'(0)$ défini sur $D(B) = \mathcal{D}$ est symétrique et essentiellement auto-adjoint, avec $U(t) = e^{-itB}$. Il est clair que B est un opérateur linéaire car la limite

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{U(s) - 1}{s} v$$

dépend linéairement de v . Par ailleurs, la dérivabilité en $t = 0$ implique celle en tout t , avec

$$\frac{d}{dt} U(t)v = U(t)U'(0)v = -iU(t)Bv = -iBU(t)v \quad (4.35)$$

où nous avons utilisé ici l'invariance de \mathcal{D} par $U(t)$. Finalement, on a

$$\left\langle w, \frac{U(s) - 1}{s} v \right\rangle = \left\langle \frac{U(s)^* - 1}{s} w, v \right\rangle = \left\langle \frac{U(-s) - 1}{s} w, v \right\rangle$$

qui, en passant à la limite $s \rightarrow 0$, montre que B est symétrique sur \mathcal{D} . Soit alors B^* l'adjoint de B et supposons que $w \in \ker(B^* + i)$. D'après (4.35), nous avons donc pour tout $t \in \mathbb{R}$

$$\frac{d}{dt} \langle w, U(t)v \rangle = \langle w, -iBU(t)v \rangle = \langle iB^*w, U(t)v \rangle = \langle w, U(t)v \rangle.$$

C'est une équation différentielle ordinaire dont la solution est

$$\langle w, U(t)v \rangle = e^t \langle w, v \rangle.$$

Or comme $U(t)$ est unitaire on a $|\langle w, U(t)v \rangle| \leq \|w\| \|v\|$ qui implique donc, en prenant $t \rightarrow +\infty$, $\langle w, v \rangle = 0$. Ainsi, $w \in \mathcal{D}^\perp = \{0\}$ car \mathcal{D} est supposé dense. Le même argument pour $-i$ et $t \rightarrow -\infty$ fournit finalement

$$\ker(B^* \pm i) = \text{Im}(B \mp i)^\perp = \{0\}.$$

D'après l'exercice 2.37, ceci montre bien que B est essentiellement auto-adjoint, de fermeture notée $A = \overline{B}$.

Il reste à montrer que $U(t) = e^{-itA}$. Nous avons déjà vu que pour tout $v \in \mathcal{D}$, $v(t) := U(t)v$ était solution de l'équation

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} v(t) = Av(t) \\ v(0) = v \end{cases}$$

(car A est une extension de B). Or nous avons expliqué à la section 4.6 que cette équation admet l'unique solution $v(t) = e^{-itA}v$, de sorte que $U(t)$ coïncide avec e^{-itA} sur \mathcal{D} . Par densité ils doivent coïncider partout.

Finalement, nous discutons de l'unicité. Supposons que $U(t) = e^{-itA'}$ pour un opérateur A' . Nous avons vu que $U(t)$ est différentiable en 0 sur le domaine \mathcal{D} introduit en (4.33) au début de la preuve. Or par le calcul fonctionnel on peut voir que $t \mapsto e^{-itA'}v$ est différentiable dans \mathfrak{H} si et seulement si $v \in D(A')$; dans ce cas la dérivée vaut $-iA'v$. Ceci montre donc que $\mathcal{D} \subset D(A')$, et que $A = A'$ sur \mathcal{D} . Comme A est essentiellement auto-adjoint sur \mathcal{D} et que A' est auto-adjoint, on doit avoir $A' = A$. \square

Remarque 4.47 (Continuité faible). *Remarquons que si $U(t)$ est faiblement continu, c'est-à-dire $\langle w, U(t)v \rangle \rightarrow \langle w, v \rangle$ quand $t \rightarrow 0$ pour tous $v, w \in \mathfrak{H}$, alors il est nécessairement fortement continu. En effet, on a*

$$\|U(t)v - v\|^2 = 2\|v\|^2 - 2\Re\langle v, U(t)v \rangle = 2\Re\langle v, (1 - U(t))v \rangle \rightarrow 0$$

puisque U est unitaire.

Dans les sections suivantes nous allons discuter des exemples les plus classiques de groupes unitaires, qui correspondent tous à des groupes de symétrie [BLR12], et calculer leur générateur infinitésimal.

4.7.2 Groupe des translations et quantité de mouvement

Plaçons-nous dans $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R})$ et considérons le groupe des translations défini par

$$(\mathcal{T}(t)v)(x) = v(x - t). \quad (4.36)$$

Ce groupe vérifie toutes les hypothèses (i)–(iii) du théorème 4.45, il peut donc être écrit sous la forme d'un propagateur de Schrödinger. Prenons alors $v \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ et calculons la dérivée explicitement

$$\frac{d}{dt} \mathcal{T}(t)v|_{t=0} = \frac{d}{dt} v(x-t)|_{t=0} = -v'(x).$$

Ainsi, le générateur est l'opérateur P^{\min} défini sur $D(P^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R})$ par $P^{\min}v = -iv'$. Nous avons déjà vu que cet opérateur est essentiellement auto-adjoint et que le domaine de sa fermeture est $H^1(\mathbb{R})$.

Corollaire 4.48 ($P = -i(d/dx)$ est le générateur des translations). *L'opérateur de translation (4.36) est donné par*

$$\mathcal{T}(t) = e^{-itP} \quad \text{où } P = -i \frac{d}{dx} \text{ sur } D(P) = H^1(\mathbb{R}).$$

En particulier, nous avons pour toute fonction $f \in L^\infty(\mathbb{R})$

$$e^{itP} f(x) e^{-itP} = f(x+t)$$

où $f(x)$ et $f(x+t)$ sont ici interprétés comme opérateurs de multiplication sur $L^2(\mathbb{R})$.

De façon similaire, en dimension d nous pouvons translater d'un vecteur $a \in \mathbb{R}^d$ en définissant

$$(\mathcal{T}(a)v)(x) = v(x-a). \quad (4.37)$$

et obtenons avec le même raisonnement que

$$\mathcal{T}(a) = e^{-ita \cdot P}$$

où l'opérateur

$$a \cdot P = -i \sum_{j=1}^d a_j \partial_{x_j}$$

est essentiellement auto-adjoint sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$. Le domaine de $a \cdot P$ est un espace de Sobolev dans la direction a

$$D(a \cdot P) = \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^d) : a \cdot \nabla v \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

que nous avons déjà rencontré pour P_j , obtenu lorsque $a = e_j$ (un vecteur de la base canonique).

4.7.3 Groupe des rotations et moment cinétique orbital

Plaçons nous en dimension $d = 2$ dans $L^2(\mathbb{R}^2)$ et considérons l'opération consistant à tourner le système autour de l'origine. Ceci revient à examiner la transformation unitaire

$$(\mathcal{R}(\theta)v)(x_1, x_2) = v(\cos(\theta)x_1 + \sin(\theta)x_2, -\sin(\theta)x_1 + \cos(\theta)x_2) = v(R_{-\theta}x) \quad (4.38)$$

où

$$R_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

est la matrice de rotation associée. À nouveau cette famille d'opérateurs satisfait les hypothèses (i)–(iii) du théorème 4.45 et il est possible d'écrire $\mathcal{R}(\theta)$ comme un propagateur de Schrödinger. Pour déterminer son générateur, prenons $v \in C_c^\infty(\mathbb{R}^2)$ et calculons

$$\frac{d}{d\theta} \mathcal{R}(\theta)v|_{\theta=0} = (x_2 \partial_{x_1} - x_1 \partial_{x_2})v.$$

Corollaire 4.49 (Générateur des rotations en 2D). *L'opérateur symétrique*

$$L^{\min} = -i(x_1 \partial_{x_2} - x_2 \partial_{x_1})$$

est essentiellement auto-adjoint sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^2)$ et sa fermeture $L = \overline{L^{\min}}$, appelée moment cinétique orbital, est le générateur des rotations :

$$\boxed{\mathcal{R}(\theta) = e^{-i\theta L}}$$

où $\mathcal{R}(\theta)$ a été défini en (4.38). Par ailleurs on a

$$D(L) = \{v \in L^2(\mathbb{R}^2) : (x_2 \partial_{x_1} - x_1 \partial_{x_2})v \in L^2(\mathbb{R}^2)\} \quad (4.39)$$

où le terme de droite est compris au sens des distributions, et bien sûr

$$\boxed{L = -i(x_1 \partial_{x_2} - x_2 \partial_{x_1})}$$

sur $D(L)$. De plus,

$$\boxed{\sigma(L) = \mathbb{Z}}$$

où chaque valeur propre est de multiplicité infinie.

Démonstration. Le seul élément nouveau est ici la formule explicite du domaine et du spectre de L . Le reste suit du théorème 4.45. L'opérateur défini sur le domaine $D(L)$ en (4.39) est fermé et il suffit donc de montrer que pour tout $v \in D(L)$ on peut trouver une suite $v_n \in C_c^\infty(\mathbb{R}^2)$ telle que $v_n \rightarrow v$ et $Lv_n \rightarrow Lv$. Ceci peut se faire en tronquant et en convolant par un noyau régularisant. Plus précisément, nous pouvons prendre

$$v_n(x) = n^2 \chi(x/n) \int_{\mathbb{R}^2} \chi(n(x-y))v(y) dy = \chi(x/n)(\chi_n * v)(x) \quad (4.40)$$

où χ est une fonction radiale de $C_c^\infty(\mathbb{R}^2)$ qui vaut 1 dans un voisinage de l'origine et telle que $\int_{\mathbb{R}^2} \chi = 1$. Nous avons aussi introduit $\chi_n(x) = n^2 \chi(nx)$. On sait déjà que $\chi_n * v$ est une fonction C^∞ qui converge vers v dans $L^2(\mathbb{R}^2)$, et comme $\chi(x/n) \rightarrow 1$ presque partout, on a $v_n \rightarrow v$ dans $L^2(\mathbb{R}^2)$. Ensuite, on remarque que $L\chi = 0$ car χ est radiale, ce qui implique après un petit calcul que

$$(Lv_n)(x) = n^2 \chi(x/n) \int_{\mathbb{R}^2} \chi(n(x-y))(Lv)(y) dy$$

qui converge vers Lv pour la même raison. Ainsi la fermeture de L^{\min} est bien l'opérateur L introduit dans l'énoncé.

Il reste à montrer que $\sigma(L) = \mathbb{Z}$. Pour cela nous notons que $\mathcal{R}(2\pi) = \mathbb{1}_{\mathfrak{H}} = e^{-i2\pi L}$, ce qui montre par le calcul fonctionnel que le spectre de L est contenu dans \mathbb{Z} (après diagonalisation, on a $e^{-2i\pi s} = 1$ pour μ -presque tout $s \in \sigma(L)$). En fait 0 est une valeur propre dont l'espace propre est de dimension infinie, car il contient toutes les fonctions radiales dans $D(L)$, c'est-à-dire invariantes par rotations. On peut aussi facilement exhiber des fonctions propres pour les autres valeurs propres, par exemple

$$(x_1 + ix_2)^n \chi(x), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (4.41)$$

avec $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})$ radiale. \square

Il est fréquent d'écrire $L = x \wedge P$ où il est ici entendu que

$$X \wedge Y = \det(XY) = x_1 y_2 - x_2 y_1.$$

Une autre écriture fréquemment rencontrée est

$$L = z \partial_z - \bar{z} \partial_{\bar{z}}$$

où $z = x_1 + ix_2$, $\partial_z = \partial_{x_1} - i \partial_{x_2}$ et $\partial_{\bar{z}} = \partial_{x_1} + i \partial_{x_2}$.

Notre étude du moment cinétique orbital peut être généralisée à la dimension $d = 3$. Par un raisonnement similaire on trouve que les rotations $\mathcal{R}_\omega(\theta)$ d'angle θ autour d'un axe $\omega \in \mathbb{S}^2$ (un vecteur de la sphère unité) sont données par

$$\mathcal{R}_\omega(\theta) = e^{-i\theta \omega \cdot L}, \quad \omega \cdot L = \sum_{j=1}^3 \omega_j L_j$$

où les trois opérateurs L_j correspondent aux rotations autour des vecteurs de la base canonique :

$$L = x \wedge (-i\nabla) = -i \begin{pmatrix} x_2 \partial_{x_3} - x_3 \partial_{x_2} \\ x_3 \partial_{x_1} - x_1 \partial_{x_3} \\ x_1 \partial_{x_2} - x_2 \partial_{x_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{pmatrix}.$$

Chacun des L_j est essentiellement auto-adjoint sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ et auto-adjoint sur

$$D(L_j) = \{v \in L^2(\mathbb{R}^3) : L_j v \in L^2(\mathbb{R}^3)\}.$$

Comme en dimension $d = 2$, on a

$$\sigma(L_j) = \mathbb{Z}.$$

Un opérateur important est le carré du moment angulaire total

$$|L|^2 := L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$$

qui est également essentiellement auto-adjoint sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$. Comme les L_j ne commutent pas entre eux, le spectre de $|L|^2$ n'est pas juste la somme des spectres. En fait, il est possible de montrer que

$$\sigma(|L|^2) = \{\ell(\ell + 1), \ell \geq 0\}.$$

Ceci joue un rôle particulier lorsqu'on étudie des opérateurs de Schrödinger avec un potentiel radial. En effet, en écrivant l'opérateur Laplacien en coordonnées sphériques on trouve

$$-\Delta + V(|x|) = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{|L|^2}{r^2} + V(r), \quad r = |x|$$

ce qui permet par exemple de calculer le spectre de l'atome d'hydrogène explicitement. Voir [Tes09, Chap. 8 & 10] pour plus de détails dans cette direction.

4.7.4 Action du groupe $SU(2)$ et moment cinétique total

Le groupe $SU(2)$ apparaît naturellement lorsqu'on considère une particule avec spin $1/2$, c'est-à-dire qu'on travaille dans $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$, puisque ce groupe permet de tourner les vecteurs de \mathbb{C}^2 . Il se trouve que ce groupe forme aussi un revêtement de $SO(3)$ [BLR12]. En effet, nous pouvons associer à chaque vecteur $x \in \mathbb{R}^3$ la matrice complexe 2×2 donnée par

$$x \cdot \sigma = \sum_{j=1}^3 x_j \sigma_j = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix}$$

où les σ_j sont les matrices de Pauli déjà rencontrées en (3.27). On a $\det(x \cdot \sigma) = -|x|^2$, $\text{Tr}(x \cdot \sigma) = 0$ et $(x \cdot \sigma)^* = x \cdot \sigma$. Ces relations sont préservées sous l'action d'un unitaire $U \in SU(2)$. On peut alors voir qu'il existe un $R_U \in SO(3)$ tel que

$$\boxed{U(x \cdot \sigma)U^* = (R_U x) \cdot \sigma.}$$

De façon équivalente,

$$U^* \sigma_k U = \sum_{j=1}^3 (R_U)_{kj} \sigma_j.$$

La relation entre U et R_U est donnée par

$$(R_U)_{ij} = \frac{1}{2} \text{Tr}(U^* \sigma_i U \sigma_j).$$

La rotation R_U tourne bien le spin du système comme désiré. En effet, le spin d'un système dans l'état $v \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$ est défini par le vecteur $\Sigma_k(v) = \langle v, \sigma_k v \rangle$ de \mathbb{R}^3 et ainsi nous avons bien

$$\langle Uv, \sigma_k Uv \rangle = \langle v, U^* \sigma_k U v \rangle = \sum_{j=1}^3 (R_U)_{kj} \langle v, \sigma_j v \rangle,$$

c'est-à-dire

$$\Sigma(Uv) = R_U \Sigma(v).$$

Plus précisément, tout $U \in SU(2)$ peut s'écrire sous la forme $U = e^{-i\theta a \cdot \sigma / 2}$ (les σ_k sont les générateurs de $SU(2)$), et il est alors possible de vérifier que R_U est la rotation d'axe $a \in \mathbb{S}^2$ et d'angle θ .

Ceci permet de faire agir le groupe $SU(2)$ sur $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$ sous la forme

$$(U \cdot v)(x) = Uv(R_U^{-1}x).$$

Nous obtenons une nouvelle famille d'unitaires

$$(\mathcal{U}_a(\theta)v)(x) = e^{-i\theta a \cdot \sigma / 2} v(R_{a, -\theta}x)$$

dont le générateur est le *moment cinétique total*

$$\boxed{J = L + \frac{1}{2}\sigma.}$$

Ce dernier est en fait un vecteur de trois opérateurs, chacun étant essentiellement auto-adjoint sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$, et qui sont donnés par

$$J_k = L_k + \frac{1}{2}\sigma_k.$$

Comme L_k commute avec la matrice constante σ_k (de spectre ± 1), le spectre de cet opérateur est juste donné par deux copies de $1/2 + \mathbb{Z}$:

$$\boxed{\sigma(J_k) = \frac{1}{2} + \mathbb{Z}.}$$

En particulier, l'observable J_k ne prend que des valeurs demi-entières.

4.7.5 Groupe des dilatations et son générateur

Considérons maintenant un autre groupe agissant sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ (en dimension quelconque), consistant à dilater une fonction. Comme le facteur de dilatation doit être un nombre positif, il est fréquent de l'écrire sous la forme e^t , ce qui permet de faire apparaître la structure de groupe. Définissons donc la famille d'unitaires

$$(\mathcal{D}(t)v)(x) = e^{\frac{-dt}{2}} v(e^{-t}x) \quad (4.42)$$

qui vérifie les propriétés (i)–(iii) du théorème 4.45. Afin de déterminer le générateur associé, nous prenons $v \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et calculons

$$\frac{d}{dt}\mathcal{D}(t)v|_{t=0} = -\frac{d}{2}v(x) - x \cdot \nabla v(x) = -\frac{1}{2}(\nabla \cdot x + x \cdot \nabla)v(x).$$

Corollaire 4.50 (Générateur des dilatations dans \mathbb{R}^d). *L'opérateur symétrique*

$$A^{\min} = -\frac{i}{2}(\nabla \cdot x + x \cdot \nabla)$$

est essentiellement auto-adjoint sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et sa fermeture $A = \overline{A^{\min}}$ est le générateur des dilatations :

$$\boxed{\mathcal{D}(t) = e^{-itA}}$$

où $\mathcal{D}(t)$ a été défini en (4.42). Par ailleurs on a

$$\begin{aligned} D(A) &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^d) : \nabla \cdot x v \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\} \\ &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^d) : \nabla \cdot x v \text{ et } x \cdot \nabla v \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\} \end{aligned} \quad (4.43)$$

et bien sûr

$$\boxed{A = -\frac{i}{2}(\nabla \cdot x + x \cdot \nabla)}$$

sur $D(A)$. De plus,

$$\boxed{\sigma(A) = \mathbb{R}}$$

qui ne contient aucune valeur propre.

Démonstration. La preuve est essentiellement la même que celle du corollaire 4.49. Pour la fermeture, nous prenons la même fonction v_n qu'en (4.40) (avec le facteur n^d au lieu de n^2), mais il y a moins d'annulation car on n'a pas $A\chi = 0$ (0 n'est pas valeur propre de A). En écrivant $A = id/2 - i\nabla \cdot x$, nous obtenons

$$Av_n = -i(\nabla \cdot x\chi)(x/n)(\chi_n * v)(x) - i\chi(x/n)(\eta_n * v)(x) + \chi(x/n)(\chi_n * Av)(x)$$

où $\eta_n = n^d(\nabla \cdot x\chi)(nx)$. Ainsi,

$$Av_n \rightarrow -i \left(\int_{\mathbb{R}^d} \nabla \cdot x\chi(x) dx \right) v + Av = Av$$

car l'intégrale est nulle. Pour déterminer le spectre nous remarquons que les fonctions homogènes $|x|^s$ sont des fonctions propres formelles de A , mais aucune n'est dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Plus précisément, nous avons au sens des distributions sur $\mathbb{R}^d \setminus \{0\}$

$$A|x|^s = \left(-i\frac{d}{2} - is \right) |x|^s.$$

Ceci suggère de choisir s sous la forme $s = -d/2 + i\lambda$. Nous pouvons régulariser la fonction correspondante en 0 et en l'infini en posant par exemple

$$u_\varepsilon = |x|^{-\frac{d}{2}+i\lambda} \frac{|x|^\varepsilon}{1+|x|^{2\varepsilon}}$$

avec $\varepsilon > 0$ de sorte que $u_\varepsilon \in L^2(\mathbb{R}^d)$. On trouve alors

$$\begin{aligned} (A - \lambda)u_\varepsilon(x) &= -i|x|^{-\frac{d}{2}+i\lambda} x \cdot \nabla \frac{|x|^\varepsilon}{1+|x|^{2\varepsilon}} \\ &= -i|x|^{-\frac{d}{2}+i\lambda} \varepsilon \frac{|x|^\varepsilon}{1+|x|^{2\varepsilon}} \left(1 - 2\frac{|x|^{2\varepsilon}}{1+|x|^{2\varepsilon}} \right) \end{aligned}$$

de sorte que

$$|(A - \lambda)u_\varepsilon(x)| \leq \varepsilon |u_\varepsilon(x)|.$$

Nous obtenons donc

$$\frac{\|(A - \lambda)u_\varepsilon\|}{\|u_\varepsilon\|} \leq \varepsilon$$

ce qui montre que $u_\varepsilon \|u_\varepsilon\|^{-1}$ est une suite de Weyl, et finalement que $\lambda \in \sigma(A)$ pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$, par le théorème 2.38. \square

Nous avons déjà évoqué l'opérateur A lors de notre étude de l'atome d'hydrogène, à propos de l'identité du Viriel (1.27).

Proposition 4.51 (Identité du Viriel / de Pohožaev). *Soit*

$$V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$$

une fonction à valeurs réelles, avec p satisfaisant (3.3). Soit u une fonction de $H^2(\mathbb{R}^d)$ telle que

$$-\Delta u(x) + V(x)u(x) = \lambda u(x). \quad (4.44)$$

Si de plus $x \cdot \nabla V(x) \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$ alors on a

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 x \cdot \nabla V(x) dx \quad (4.45)$$

ce qui fournit en particulier la relation

$$\lambda = \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 \left(V(x) + \frac{1}{2}x \cdot \nabla V(x) \right) dx. \quad (4.46)$$

Remarque 4.52. Si $V(x) + \frac{1}{2}x \cdot \nabla V(x) < 0$ (par exemple pour $V(x) = -|x|^{-s}$ avec $0 < s < 2$) nous voyons que $-\Delta + V$ ne peut pas avoir de valeur propre positive ou nulle. Il existe de nombreuses améliorations de ce résultat [RS78, Sec. XIII.13].

Démonstration. L'idée est de multiplier l'équation par \overline{Au} et d'intégrer par parties. Malheureusement, nous ne savons pas que u est dans le domaine de A . En tirant profit du fait que $u \in H^2(\mathbb{R}^d)$, nous allons donc plutôt multiplier par la régularisation de \overline{Au} sous la forme

$$i\frac{d}{2}\overline{u(x)} + i\frac{x}{1+\varepsilon|x|^2} \cdot \nabla \overline{u(x)} \in H^1(\mathbb{R}^d),$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} & \frac{d}{2} \left(\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} (V(x) - \lambda) |u(x)|^2 dx \right) \\ &= \Re \int_{\mathbb{R}^d} \Delta u(x) \nabla \overline{u(x)} \cdot \frac{x}{1+\varepsilon|x|^2} dx - \Re \int_{\mathbb{R}^d} \frac{(V(x) - \lambda)x}{1+\varepsilon|x|^2} \cdot \nabla \overline{u(x)} u(x) dx. \end{aligned} \quad (4.47)$$

En remarquant que $\Re(u \nabla \overline{u}) = \nabla |u|^2 / 2$ et en utilisant l'hypothèse sur $x \cdot \nabla V$, nous pouvons intégrer par parties la seconde intégrale, ce qui donne

$$\begin{aligned} & \Re \int_{\mathbb{R}^d} \frac{(V(x) - \lambda)x}{1+\varepsilon|x|^2} \cdot \nabla \overline{u(x)} u(x) dx \\ &= -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 \operatorname{div} \frac{(V(x) - \lambda)x}{1+\varepsilon|x|^2} dx \\ &= -\frac{d}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 \frac{V(x) - \lambda}{1+\varepsilon|x|^2} dx - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 x \cdot \nabla \frac{V(x) - \lambda}{1+\varepsilon|x|^2} dx \\ &= -\frac{d}{2} \int_{\mathbb{R}^d} (V(x) - \lambda) |u(x)|^2 dx - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |u(x)|^2 x \cdot \nabla V(x) dx + o(1). \end{aligned}$$

De façon similaire, nous avons pour le premier terme

$$\begin{aligned}
& \Re \int_{\mathbb{R}^d} \Delta u(x) \overline{\nabla u(x)} \cdot \frac{x}{1 + \varepsilon|x|^2} dx \\
&= \sum_{i,j=1}^d \Re \int_{\mathbb{R}^d} \partial_{jj} u(x) \frac{x_i}{1 + \varepsilon|x|^2} \overline{\partial_i u(x)} dx \\
&= - \sum_{i,j=1}^d \Re \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{\delta_{ij} - 2\varepsilon x_i x_j (1 + \varepsilon|x|^2)^{-1}}{1 + \varepsilon|x|^2} \right) \overline{\partial_i u(x)} \partial_j u(x) dx \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 \operatorname{div} \frac{x}{1 + \varepsilon|x|^2} dx \\
&= \left(-1 + \frac{d}{2} \right) \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + o(1).
\end{aligned}$$

Dans la seconde égalité nous avons d'abord intégré par parties l'une des dérivées ∂_j , puis nous avons intégré par parties ∂_i pour le terme

$$\Re(\partial_j u \overline{\partial_i u}) = \frac{1}{2} \partial_i |\partial_j u|^2,$$

ce qui fournit la divergence de $x(1 + \varepsilon|x|^2)^{-1}$. En insérant dans (4.47) et en prenant la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ nous arrivons bien à (4.45). \square

4.8 Commutateurs et quantités conservées

Si A et B sont deux opérateurs auto-adjoints bornés, on peut définir leur *commutateur* par

$$[A, B] = AB - BA.$$

Si ce commutateur s'annule, on dit que A et B commutent et on trouve que l'observable B est constante le long des trajectoires du flot de Schrödinger généré par A , c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle e^{-itA} v, B e^{-itA} v \rangle &= \langle -iA e^{-itA} v, B e^{-itA} v \rangle + \langle e^{-itA} v, -iB A e^{-itA} v \rangle \\
&= i \langle e^{-itA} v, [A, B] e^{-itA} v \rangle = 0
\end{aligned}$$

pour tout $v \in \mathfrak{H}$. En d'autres termes, on a

$$e^{itA} B e^{-itA} = B, \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

qui signifie juste que $[e^{itA}, B] = 0$. Ceci étant valable pour tout t , on conclut aisément que $[f(A), B] = 0$ pour toute fonction f bornée puis, en raisonnant de la même façon pour B , que $[f(A), g(B)] = 0$.

La généralisation de cet argument à des opérateurs non bornés n'est pas évidente à cause de la difficulté à définir le commutateur $[A, B]$. On pourrait penser demander par exemple que $[A, B]$ fasse sens et soit nul sur un

sous-espace \mathcal{D} dense de \mathfrak{H} , mais cette notion n'a pas les propriétés attendues [RS72, Sec. VIII.5]. Voici un résultat qui précise comment aborder cette question différemment.

Théorème 4.53 (Commutateur). *Soient A et B deux opérateurs auto-adjoints sur leurs domaines respectifs $D(A), D(B) \subset \mathfrak{H}$. Les propositions suivantes sont équivalentes :*

- (i) $[f(A), g(B)] = 0$ pour tous f, g continues bornées sur un voisinage de $\sigma(A) \cup \sigma(B)$;
- (ii) $[e^{itA}, e^{isB}] = 0$ pour tous $t, s \in \mathbb{R}$;
- (iii) $[(A - z)^{-1}, (B - z')^{-1}] = 0$ pour tous $z, z' \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$;
- (iv) $[\mathbb{1}_I(A), \mathbb{1}_{I'}(B)] = 0$ pour tous intervalles $I, I' \subset \mathbb{R}$;
- (v) $D(A)$ est stable par e^{itB} pour tout $t \in \mathbb{R}$ et on a $e^{itB}A = Ae^{itB}$ sur $D(A)$;
- (vi) $D(B)$ est stable par e^{itA} pour tout $t \in \mathbb{R}$ et on a $e^{itA}B = Be^{itA}$ sur $D(B)$.

Si ces conditions équivalentes sont vérifiées, on dit que A et B commutent.

En particulier, si A et B commutent et $v_0 \in D(B)$, on conclut bien que $v(t) = e^{-itA}v_0$ appartient à $D(B)$ pour tout t et que la valeur moyenne de l'observable B est constante au cours du temps :

$$\langle v(t), Bv(t) \rangle = \langle v_0, e^{itA}Be^{-itA}v_0 \rangle = \langle v_0, Bv_0 \rangle.$$

Démonstration. L'équivalence entre (i)–(iv) suit du calcul fonctionnel et du fait que les fonctions considérées génèrent toutes les fonctions bornées. Nous allons donc montrer que, par exemple, (vi) est équivalent à (i). Si (i) est vraie, alors e^{itA} commute avec $B(1 + \varepsilon B^2)^{-1} = f(B)$ où $f(x) = x/(1 + \varepsilon x^2)$ est bornée, donc

$$\|B(1 + \varepsilon B^2)^{-1}e^{itA}v\| = \|e^{itA}B(1 + \varepsilon B^2)^{-1}v\| = \|B(1 + \varepsilon B^2)^{-1}v\|$$

pour tout $t \in \mathbb{R}$. Comme on a par le théorème spectral et le calcul fonctionnel

$$w \in D(B) \iff \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \|B(1 + \varepsilon B^2)^{-1}w\| < \infty$$

avec dans ce cas $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} B(1 + \varepsilon B^2)^{-1}v = Bv$, on conclut bien que $e^{itA}v \in D(B)$ pour tout $v \in D(B)$, et que $Be^{itA}v = e^{itA}Bv$.

Réciproquement, si $Be^{itA} = e^{itA}B$ sur $D(B)$, nous en déduisons que $e^{-itA}Be^{itA} = B$ et ainsi $e^{-itA}(B - z)e^{itA} = B - z$ sur $D(B)$ pour tout $t \in \mathbb{R}$ et tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Or

$$\underbrace{e^{-itA}(B - z)e^{itA}}_{=B-z} e^{-itA}(B - z)^{-1}e^{itA} = e^{-itA}(B - z)(B - z)^{-1}e^{itA} = \mathbb{1}_{\mathfrak{H}}$$

ce qui montre que $e^{-itA}(B-z)^{-1}e^{itA} = (B-z)^{-1}$ ou, écrit différemment,

$$[e^{-itA}, (B-z)^{-1}] = 0, \quad \forall t \in \mathbb{R}, \forall z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}.$$

Par le même argument que pour (i)–(iv), on conclut bien que $[f(A), g(B)] = 0$ pour tous f, g continues bornées. \square

Exemple 4.54. *Considérons un opérateur de Schrödinger sous la forme $H = -\Delta + V(x)$ où $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ est une fonction à valeurs réelles. Alors H est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^3)$ par le théorème 3.5. Par ailleurs, nous avons $e^{-ia \cdot L} H^2(\mathbb{R}^3) \subset H^2(\mathbb{R}^3)$ où L est le moment cinétique orbital pour tout $a \in \mathbb{R}^3$, car $e^{-ia \cdot L}$ consiste juste à appliquer une rotation sur les fonctions, ce qui conserve le caractère $H^2(\mathbb{R}^3)$. Si V est une fonction radiale, ce qui signifie que $V(Rx) = V(x)$ pour toute rotation $R \in SO(3)$, on a alors*

$$e^{ia \cdot L} H e^{-ia \cdot L} = H$$

pour tout $a \in \mathbb{R}^3$, sur $D(H) = H^2(\mathbb{R}^3)$. Nous concluons que H commute avec $a \cdot L$ pour tout $a \in \mathbb{R}^3$. En particulier, on a

$$e^{itH} L_j e^{-itH} = L_j, \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

et le moment angulaire est donc préservé le long des trajectoires.

Exercices complémentaires

Exercice 4.55 (Formule de Helffer-Sjöstrand et densité de \mathcal{A}). *Soit $f \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ une fonction C^∞ à support compact. Nous introduisons une extension “quasi-analytique” de f sur \mathbb{C} par*

$$\tilde{f}(z) = (f(x) + iyf'(x))\chi\left(\frac{y}{\sqrt{1+x^2}}\right)$$

où $z = x + iy$ et χ est une fonction C^∞ à support compact dans $[-2, 2]$ qui est constante égale à 1 sur $[-1, 1]$. On remarquera que $\tilde{f}|_{\mathbb{R}} = f$. Montrer alors la formule

$$f(x) = -\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial \tilde{f}(z)}{\partial \bar{z}} \frac{dz}{x-z} \quad (4.48)$$

où

$$\frac{\partial \tilde{f}(z)}{\partial \bar{z}} = \frac{\partial \tilde{f}(z)}{\partial x} + i \frac{\partial \tilde{f}(z)}{\partial y}.$$

En déduire en particulier que $\text{vect}\{(x-z)^{-1}, z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}\}$ est un sous-espace dense dans $C_0^0(\mathbb{R})$. Pour une preuve du théorème 4.22 basée sur la formule (4.48), voir [Dav95].

Exercice 4.56 (Espaces invariants). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. On dit qu'un sous-espace fermé $\mathfrak{K} \subset \mathfrak{H}$ est A -invariant si $(A-z)^{-1}\mathfrak{K} \subset \mathfrak{K}$ pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$.*

1. Montrer alors que $f(A)\mathfrak{K} \subset \mathfrak{K}$ pour tout $f \in C_0^0(\mathbb{R}, \mathbb{C})$.
2. Montrer que \mathfrak{K}^\perp est aussi A -invariant.
3. Montrer que \mathfrak{K} est A -invariant si et seulement si A commute avec le projecteur orthogonal $\Pi_{\mathfrak{K}}$ sur \mathfrak{K} , au sens de la section 4.8.

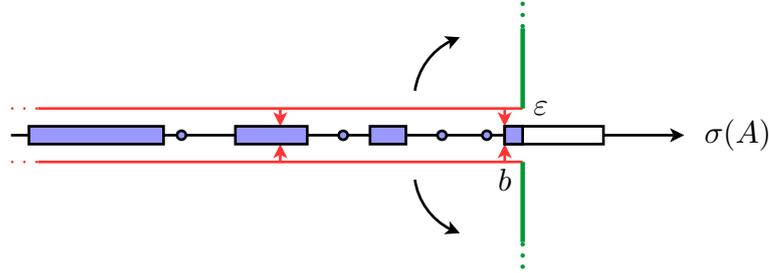


FIGURE 4.4 – Les formules de Stone (4.49) et (4.50) permettent d'exprimer un projecteur spectral sous la forme $\mathbb{1}_{]-\infty, b]}(A)$ comme l'intégrale de la résolvante $(A - z)^{-1}$ sur les droites représentées.

Exercice 4.57 (Laplacien et vecteurs cycliques). *Considérons l'opérateur $A = -d^2/dx^2$ qui est auto-adjoint sur $D(A) = H^2(\mathbb{R}) \subset \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R})$. En utilisant le fait que*

$$L^2(\mathbb{R}) = L^2_{\text{pair}}(\mathbb{R}) \oplus L^2_{\text{impair}}(\mathbb{R})$$

(somme orthogonale de l'espace des fonctions paires et des fonctions impaires), montrer que A n'a aucun vecteur cyclique. Montrer par contre qu'il existe deux vecteurs v_1 et $v_2 \in \mathfrak{H}$ tels que $L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{X}_{v_1} \oplus \mathcal{X}_{v_2}$, de sorte que dans la représentation du Laplacien en opérateur de multiplication nous pouvons utiliser seulement deux copies de $\sigma(A) = [0, \infty)$ dans \mathbb{R}^2 . Qu'en est-il du Laplacien en dimension supérieure ?

Exercice 4.58 (Projecteurs $\mathbb{1}_{]-\infty, b]}(A)$). *Montrer que l'on peut prendre $a = -\infty$ dans la formule (4.22), de sorte que*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2i\pi} \int_{-\infty}^b ((A - s - i\varepsilon)^{-1} - (A - s + i\varepsilon)^{-1}) ds v = \left(\mathbb{1}_{]-\infty, b]}(A) + \frac{1}{2} \mathbb{1}_{\{b\}}(A) \right) v. \quad (4.49)$$

En tournant les deux axes (Figure 4.4), montrer également la formule

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{-\varepsilon} ((A - b - is)^{-1} - (A - b + is)^{-1}) ds v = \left(\mathbb{1}_{]-\infty, b[}(A) + \frac{1}{2} \mathbb{1}_{\{b\}}(A) \right) v. \quad (4.50)$$

Chapitre 5

Spectre des opérateurs auto-adjoints

Dans ce chapitre nous étudions plus précisément le spectre des opérateurs auto-adjoints.

5.1 Spectre essentiel et spectre discret

Nous avons déjà introduit le concept de *valeur propre* qui correspond aux éléments λ du spectre tels que $\ker(A - \lambda) \neq \{0\}$. L'ensemble de toutes les valeurs propres est habituellement appelé *spectre ponctuel*, car il correspond aux $\lambda \in \sigma(A)$ tels que $\sum_{n \geq 0} \mu(\{(\lambda, n)\}) > 0$ dans la représentation où A devient l'opérateur de multiplication par la fonction $a(s, n) = s$ sur $L^2(\sigma(A) \times \mathbb{N}, d\mu)$. Alors μ charge certains des points $(\lambda, n)_{n \geq 0}$. Le complémentaire du spectre ponctuel est habituellement appelé *spectre continu*.

Exemple 5.1. *Considérons l'opérateur M_0 de multiplication par la fonction nulle sur $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1[)$. Il est tel que $\sigma(M_0) = \{0\}$ avec $\ker(M_0) = L^2(]0, 1[)$, c'est-à-dire n'y a que du spectre ponctuel. Par contre, l'opérateur M_ε de multiplication par la fonction $f_\varepsilon(x) = \varepsilon x$ a le spectre $\sigma(M_\varepsilon) = [0, \varepsilon]$ et il ne possède aucune valeur propre, d'après le théorème 4.4.*

L'exemple précédent montre que la séparation de $\sigma(A)$ en spectres ponctuel et continu n'est pas stable par rapport aux petites perturbations, ce qui amène souvent à considérer une autre classification.

Définition 5.2 (Spectres discret et essentiel). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. On appelle spectre discret et on note $\sigma_{\text{disc}}(A)$ l'ensemble des valeurs propres isolées de multiplicité finie. On appelle spectre essentiel et on note $\sigma_{\text{ess}}(A)$ son complémentaire dans $\sigma(A)$.*

Rappelons qu'un point $\lambda \in \sigma(A)$ du spectre est dit isolé lorsqu'il existe $\varepsilon > 0$ tel que $[\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon] \cap \sigma(A) = \{\lambda\}$.

5.1.1 Stabilité du spectre discret

Il est possible de montrer que le spectre discret est stable par petites perturbations relativement bornées. Par stable nous voulons dire que le spectre peut bouger avec la perturbation, mais reste du même type.

Théorème 5.3 (Théorie des perturbations pour $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$ et $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$ une valeur propre isolée de multiplicité*

$$k = \dim \ker(A - \lambda) < \infty.$$

Soient $a < \lambda < b$ tels que $[a, b] \cap \sigma(A) = \{\lambda\}$. Soit B un opérateur symétrique sur $D(A)$, tel que

$$\|B(A - a)^{-1}\| < 1 \quad \text{et} \quad \|B(A - b)^{-1}\| < 1. \quad (5.1)$$

Alors l'opérateur $A + B$ est auto-adjoint sur $D(A)$ et son projecteur spectral $\mathbb{1}_{[a, b]}(A + B)$ est de rang exactement égal à k . C'est-à-dire, le spectre de $A + B$ dans $[a, b]$ est composé d'au plus k valeurs propres, dont la somme des multiplicités est égale à k . De plus, on a

$$a, b \notin \sigma(A + B).$$

Finalement, on a l'estimée suivante sur la différence des projecteurs spectraux correspondants :

$$\begin{aligned} \|\mathbb{1}_{[a, b]}(A + B) - \mathbb{1}_{\{\lambda\}}(A)\| &\leq \frac{1}{2\pi} \left(\|B(A - a)^{-1}\| + \|B(A - b)^{-1}\| \right) \times \\ &\times \left\{ \frac{5}{2} + \frac{2(b - a)}{d(\{a, b\}, \sigma(A)) \left(1 - \max_{z=a, b} \|B(A - z)^{-1}\| \right)} \right\}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Remarque 5.4. *Si B est un opérateur borné, on peut remplacer l'estimée (5.1) par la condition plus simple*

$$\|B\| < d(\{a, b\}, \sigma(A)),$$

la distance de $\{a, b\}$ au spectre de A , d'après le corollaire 4.10.

Remarque 5.5. *Nous avons fourni l'estimée explicite (5.2) pour illustrer la méthode de preuve basée sur la formule de Cauchy. Cette estimée n'est en aucun cas optimale et peut être améliorée.*

Démonstration. L'hypothèse (5.1) implique que

$$\begin{aligned} \|Bv\| &= \|B(A - z)^{-1}(A - z)v\| \\ &\leq \|B(A - z)^{-1}\| \left(\|Av\| + |z| \|v\| \right) \end{aligned}$$

pour $z \in \{a, b\}$, qui montre que $A + B$ est auto-adjoint sur $D(A)$, par le théorème 3.1 de Rellich-Kato. Par ailleurs,

$$(A + B - z) = (1 + B(A - z)^{-1})(A - z) \quad (5.3)$$

est inversible d'inverse borné, donc $a, b \notin \sigma(A + B)$. Nous pouvons même donner une estimée sur la taille des voisinages de a et b qui n'intersectent pas $\sigma(A + B)$. En effet, par la relation (5.3) nous aurons $z \notin \sigma(A + B)$ quand $\|B(A - z)^{-1}\| < 1$ et $z \in \rho(A)$. Comme

$$\|B(A - z)^{-1}\| \leq \|B(A - a)^{-1}\| \left\| \frac{A - a}{A - z} \right\|$$

avec, par le corollaire 4.10,

$$\left\| \frac{A - a}{A - z} \right\| \leq 1 + \frac{|z - a|}{d(z, \sigma(A))},$$

nous en déduisons que

$$\rho(A) \cap \left\{ z \in \mathbb{R} : \frac{|z - a|}{d(z, \sigma(A))} < \frac{1}{\|B(A - a)^{-1}\|} - 1 \right\} \subset \rho(A + B). \quad (5.4)$$

Ceci fournit un voisinage de a qui n'intersecte pas le spectre de $A + B$, la taille de ce voisinage ne dépendant que de A , de a et de $\|B(A - a)^{-1}\|$. Il y a bien sûr une estimée similaire au voisinage de b . Sur ces deux voisinages, nous avons

$$(A + B - z)^{-1} = (A - z)^{-1} (1 + B(A - z)^{-1})^{-1}. \quad (5.5)$$

Pour comprendre la nature du spectre de $A + B$ dans l'intervalle $[a, b]$, nous raisonnons de proche en proche et introduisons le projecteur spectral

$$P(\varepsilon) = \mathbf{1}_{[a, b]}(A + \varepsilon B)$$

où l'opérateur $A + \varepsilon B$ satisfait les mêmes propriétés que $A + B$ pour $0 \leq \varepsilon \leq 1$ car bien sûr εB vérifie aussi (5.1). Comme le spectre de $A + \varepsilon B$ ne rencontre jamais a et b , nous pouvons utiliser la formule de Cauchy (4.21), avec une courbe dans le plan complexe qui croise l'axe réel uniquement en ces deux points et entoure l'intervalle $[a, b]$ (par exemple un rectangle dont les longs côtés sont parallèles à l'axe réel). En particulier, nous trouvons

$$P(\varepsilon) - P(\varepsilon') = -\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \left(\frac{1}{A + \varepsilon B - z} - \frac{1}{A + \varepsilon' B - z} \right) dz. \quad (5.6)$$

De plus, la taille des voisinages autour de a et b qui n'intersectent pas $\sigma(A + \varepsilon B)$ est indépendante de ε , par (5.4). Comme d'après (5.5)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{A + \varepsilon B - z} - \frac{1}{A + \varepsilon' B - z} \\ &= (\varepsilon' - \varepsilon) \frac{1}{A + \varepsilon B - z} B \frac{1}{A + \varepsilon' B - z} \\ &= (\varepsilon' - \varepsilon) \frac{1}{A + \varepsilon B - z} B \frac{1}{A - z} (1 + \varepsilon' B(A - z)^{-1})^{-1} \end{aligned} \quad (5.7)$$

où l'opérateur à droite est uniformément borné pour $z \in \mathcal{C}$, nous avons

$$\|P(\varepsilon) - P(\varepsilon')\| \leq C|\varepsilon - \varepsilon'|.$$

Ceci prouve que l'application $\varepsilon \mapsto P(\varepsilon)$ est continue de $[0, 1]$ pour la norme d'opérateur sur \mathfrak{H} . Nous utilisons maintenant le lemme suivant

Lemme 5.6 (Paires de projecteurs). *Soient P et P' deux projecteurs orthogonaux sur un espace de Hilbert \mathfrak{H} , tels que $\|P - P'\| < 1$. Alors $\text{rang}(P) = \text{rang}(P')$.*

Preuve du lemme. Si les projecteurs sont tous les deux de rang infini, il n'y a rien à démontrer. Supposons par exemple que P est de rang $k < \infty$. Si l'image de P' est de dimension $\geq k+1$, alors elle doit intersecter l'orthogonal de l'image de P , c'est-à-dire $\ker P$. Mais pour $v \in \text{Im}(P') \cap \ker(P)$ nous avons $(P - P')v = -v$ donc $\|(P - P')v\| = \|v\|$ qui contredit l'hypothèse que $\|P - P'\| < 1$. Ainsi $\text{rang}(P') \leq \text{rang}(P)$. En particulier, P' est de rang fini et on trouve l'autre inégalité en inversant P et P' . \square

Le lemme permet de déduire de proche en proche que $\text{rang } P(\varepsilon) = k$ pour tout $\varepsilon \in [0, 1]$, puisque l'application $\varepsilon \mapsto P(\varepsilon)$ est continue. Ainsi $P(1) = \mathbf{1}_{[a,b]}(A+B)$ est de rang k , ce qui implique le résultat, par le théorème spectral.

Finalement, nous pouvons donner une estimée explicite sur $P(1) - P(0)$. Nous prenons pour cela une courbe \mathcal{C} qui est un rectangle, symétrique par rapport à l'axe réel, dont les côtés horizontaux sont situés à une distance δ de l'axe. Sur le côté vertical du rectangle, qui passe en a , donné par

$$\{z = a + i\mu, \mu \in [-\delta, \delta]\},$$

nous utilisons la relation (5.7) et l'estimée

$$\begin{aligned} \|(A + B - z)^{-1} - (A - z)^{-1}\| &= \|(A + B - z)^{-1}B(A - z)^{-1}\| \\ &\leq \|(A + B - a)^{-1}\| \|B(A - a)^{-1}\| \end{aligned}$$

car

$$\left\| \frac{C - a}{C - a + i\mu} \right\| \leq 1$$

pour tout opérateur auto-adjoint C , par le calcul fonctionnel. Par (5.3), nous avons

$$\|(A + B - a)^{-1}\| \leq \frac{\|(A - a)^{-1}\|}{1 - \|B(A - a)^{-1}\|}$$

de sorte que

$$\|(A + B - z)^{-1} - (A - z)^{-1}\| \leq \frac{\|B(A - a)^{-1}\|}{d(a, \sigma(A)) (1 - \|B(A - a)^{-1}\|)}.$$

Il y a une estimée similaire sur l'autre côté vertical. Finalement, sur la moitié gauche des deux côté horizontaux nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \|(A + B - z)^{-1} - (A - z)^{-1}\| &\leq \frac{\|(A - a)(A - z)^{-1}\| \|B(A - a)^{-1}\|}{\delta} \\ &\leq \frac{4\delta + (b - a)}{2\delta^2} \|B(A - a)^{-1}\| \end{aligned}$$

(faire un dessin) et il y a une estimée similaire sur la moitié droite, avec $\|B(A - b)^{-1}\|$. En intégrant sur le rectangle nous avons donc prouvé que

$$\begin{aligned} \|P(1) - P(0)\| &\leq \frac{1}{2\pi} \left(\|B(A - a)^{-1}\| + \|B(A - b)^{-1}\| \right) \times \\ &\quad \times \left(\frac{2\delta}{d(\{a, b\}, \sigma(A)) (1 - \max_{z=a, b} \|B(A - z)^{-1}\|)} \right. \\ &\quad \left. + (b - a) \frac{4\delta + (b - a)}{2\delta^2} \right). \end{aligned}$$

S'il est possible d'optimiser par rapport à δ , on trouve l'estimée (5.2) en prenant $\delta = b - a$. \square

5.1.2 Caractérisation de Weyl

Après avoir montré la stabilité des éléments de $\sigma_{\text{disc}}(A)$, nous donnons maintenant une caractérisation à l'aide des suites de Weyl de son complémentaire, le spectre essentiel. Rappelons que $\lambda \in \sigma(A)$ si et seulement s'il existe une suite $(v_n) \subset D(A)$ telle que $\|v_n\| = 1$ et $(A - \lambda)v_n \rightarrow 0$ (théorème 2.38).

Théorème 5.7 (Caractérisation de Weyl du spectre essentiel). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Alors on a*

$$\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$$

si et seulement s'il existe une suite $(v_n) \subset D(A)$ telle que

- $\|v_n\| = 1$;
- $(A - \lambda)v_n \rightarrow 0$;
- $v_n \rightharpoonup 0$ faiblement dans \mathfrak{H} .

Démonstration. Par le théorème spectral (voir aussi le corollaire 4.11), nous avons

$$\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A) \iff \dim L^2([\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon] \times \mathbb{N}, d\mu) < \infty$$

pour un $\varepsilon > 0$, dans la représentation où A devient l'opérateur de multiplication par la fonction $a(s, n) = s$. Ainsi,

$$\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A) \iff \dim L^2([\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon] \times \mathbb{N}, d\mu) = \infty, \quad \forall \varepsilon > 0.$$

Commençons alors par montrer l'implication directe. Si $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, nous construisons une suite normalisée v_n par récurrence en prenant

$$v_n \in L^2([\lambda - 1/n, \lambda + 1/n] \times \mathbb{N}, d\mu)$$

avec l'hypothèse supplémentaire que $v_n \in \text{vect}(v_1, \dots, v_{n-1})^\perp$. Comme $L^2([\lambda - 1/n, \lambda + 1/n] \times \mathbb{N}, d\mu)$ est de dimension infinie, nous pouvons toujours trouver un tel vecteur. Alors $v_n \rightharpoonup 0$ par construction et par ailleurs

$$\|(A - \lambda)v_n\|^2 = \int_{\sigma(A) \times \mathbb{N}} |s - \lambda|^2 |v_n(s, j)|^2 d\mu(s, j) \leq \frac{\|v_n\|^2}{n^2} = \frac{1}{n^2} \rightarrow 0$$

comme nous voulions.

Réciproquement, si $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$, alors nous avons par le théorème spectral

$$\|\mathbf{1}_{\mathbb{R} \setminus \{\lambda\}}(A)(A - \lambda)v\| \geq \delta \|\mathbf{1}_{\mathbb{R} \setminus \{\lambda\}}(A)v\|$$

pour tout $v \in D(A)$ car on a $|s - \lambda| \geq \delta$ μ -presque partout sur $\sigma(A) \setminus \{\lambda\} \times \mathbb{N}$, pour un $\delta > 0$. Prenons alors une suite de Weyl (v_n) telle que $\|v_n\| = 1$ et $(A - \lambda)v_n \rightarrow 0$. En écrivant

$$(A - \lambda)v_n = \mathbf{1}_{\mathbb{R} \setminus \{\lambda\}}(A)(A - \lambda)v_n$$

nous trouvons

$$\|(A - \lambda)v_n\|^2 \geq \delta^2 \|\mathbf{1}_{\mathbb{R} \setminus \{\lambda\}}(A)v_n\|^2$$

qui implique donc que $\mathbf{1}_{\mathbb{R} \setminus \{\lambda\}}v_n \rightarrow 0$ fortement dans \mathfrak{H} . Ceci montre que la suite

$$v_n = \mathbf{1}_{\{\lambda\}}(A)v_n + \mathbf{1}_{\mathbb{R} \setminus \{\lambda\}}(A)v_n = \mathbf{1}_{\{\lambda\}}(A)v_n + o(1)$$

est compacte car le projecteur spectral $\mathbf{1}_{\{\lambda\}}(A)$ est de rang fini donc compact (voir la section 5.2.1 pour des rappels sur les opérateurs compacts). Plus précisément, nous avons

$$\mathbf{1}_{\{\lambda\}}(A)v_n = \sum_{j=1}^k \langle e_j, v_n \rangle e_j$$

où (e_1, \dots, e_k) forme une base orthonormée de $\ker(A - \lambda)$. Chacun des $\langle e_j, v_n \rangle$ possède une sous-suite convergente. En particulier, il est impossible que $v_n \rightarrow 0$ car il en découlerait $v_n \rightarrow 0$ fortement, ce qui contredirait la propriété de normalisation $\|v_n\| = 1$. En fait (v_n) converge fortement à sous-suites près. \square

Exercice 5.8 ($\sigma_{\text{ess}}(A)$ est fermé). *Montrer que le spectre essentiel d'un opérateur auto-adjoint est toujours fermé.*

Le tableau 5.1 fournit un résumé de la caractérisation des éléments du spectre à l'aide des suites de Weyl.

$\lambda \in \sigma(A)$	Il existe une suite $(v_n) \subset D(A)$ telle que $\ v_n\ = 1$ et $(A - \lambda)v_n \rightarrow 0$ fortement (suite de Weyl)
$\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$	Il existe une suite de Weyl telle que $v_n \rightharpoonup 0$ faiblement
$\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$	Toutes les suites de Weyl ont des sous-suites fortement convergentes dans \mathfrak{H}
$\lambda \in \sigma_{\text{cont}}(A)$	Toutes les suites de Weyl (v_n) vérifient $v_n \rightharpoonup 0$ faiblement
$\lambda \in \sigma_{\text{pon}}(A)$	Il existe une suite de Weyl qui admet une limite faible différente de 0. De façon équivalente, $\ker(A - \lambda) \neq \{0\}$.

TABLE 5.1 – Caractérisation des éléments du spectre d'un opérateur auto-adjoint à l'aide des suites de Weyl.

Remarque 5.9 (Critère de Weyl pour les opérateurs non auto-adjoints). *Il n'y a pas de définition univoque du spectre essentiel et du spectre discret pour un opérateur non auto-adjoint [RS78, Sec. XIII.4]. Par exemple, dans le cas non auto-adjoint un point isolé du spectre n'est pas toujours une valeur propre. Cependant, la théorie fonctionne de façon très similaire si on ajoute l'hypothèse que l'opérateur est diagonalisable, c'est-à-dire unitairement équivalent à un opérateur de multiplication par une fonction localement bornée.*

Si A est un opérateur auto-adjoint, considérons $B = (A - z)^{-1}$ avec $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(A)$, qui est borné mais n'est pas auto-adjoint quand $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Il est cependant unitairement équivalent à un opérateur de multiplication, par le théorème spectral appliqué à A . Alors ses valeurs propres isolées (dans \mathbb{C}) et de multiplicité finie sont exactement données par

$$\sigma_{\text{disc}}((A - z)^{-1}) = \{(\lambda - z)^{-1}, \lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)\},$$

car la fonction $x \mapsto (x - z)^{-1}$ est bijective et continue sur un voisinage de $\sigma(A)$. Le spectre essentiel est alors égal à

$$\sigma_{\text{ess}}((A - z)^{-1}) = \{(\lambda - z)^{-1}, \lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)\} \cup \begin{cases} \emptyset & \text{si } A \text{ est borné,} \\ \{0\} & \text{si } A \text{ est non borné.} \end{cases}$$

En effet, 0 est un point d'accumulation du spectre de $(A - z)^{-1}$ lorsque A n'est pas borné. Le spectre essentiel $\sigma_{\text{ess}}((A - z)^{-1})$ est caractérisé par les suites de Weyl exactement comme au théorème 5.7, avec une preuve similaire.

Il existe une formule basée sur les suites de Weyl, fournissant le bas du spectre essentiel sous l'hypothèse supplémentaire que l'opérateur est borné inférieurement.

Théorème 5.10 (Formule pour $\min \sigma_{\text{ess}}(A)$). *Soit A un opérateur auto-*

adjoint borné inférieurement sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Alors on a

$$\boxed{\min \sigma_{\text{ess}}(A) = \min_{\substack{v_n \in D(A) \\ \|v_n\|=1 \\ v_n \rightarrow 0}} \liminf_{n \rightarrow \infty} \langle v_n, Av_n \rangle = \min_{\substack{v_n \in Q(A) \\ \|v_n\|=1 \\ v_n \rightarrow 0}} \liminf_{n \rightarrow \infty} q_A(v_n).} \quad (5.8)$$

La convergence faible dans les deux minima de la formule (5.8) est supposée dans \mathfrak{H} seulement (pas dans $Q(A)$ ou dans $D(A)$). Le minimum à gauche est pris égal à $+\infty$ par convention, si $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$, auquel cas la formule (5.8) signifie simplement que $q_A(v_n) \rightarrow +\infty$ pour toute suite $v_n \in Q(A)$ telle que $\|v_n\| = 1$ et $v_n \rightarrow 0$.

Démonstration. L'égalité des deux termes à droite de (5.8) suit de la densité de $D(A)$ dans $Q(A)$ pour la norme associée.

Supposons d'abord $\sigma_{\text{ess}}(A) \neq \emptyset$. Comme $\Sigma(A) := \min \sigma_{\text{ess}}(A)$ appartient à l'ensemble fermé $\sigma_{\text{ess}}(A)$ (Exercice 5.8), il existe une suite de Weyl satisfaisant $\|v_n\| = 1$, $(A - \Sigma(A))v_n \rightarrow 0$ et $v_n \rightarrow 0$. En prenant le produit scalaire contre v_n on trouve que $\langle v_n, (A - \Sigma(A))v_n \rangle \rightarrow 0$, c'est-à-dire $\langle v_n, Av_n \rangle \rightarrow \Sigma(A)$. Réciproquement, si $v_n \in D(A)$ est telle que $\liminf_{n \rightarrow \infty} q_A(v_n) < \infty$, alors on peut écrire

$$A = A\mathbf{1}_{]-\infty, \Sigma(A) - \varepsilon]}(A) + A\mathbf{1}_{] \Sigma(A) - \varepsilon, +\infty[}(A)$$

où le premier opérateur $R = A\mathbf{1}_{]-\infty, \Sigma(A) - \varepsilon]}(A)$ est de rang fini car le spectre de A est composé d'un nombre fini de valeurs propres de multiplicités finies dans $]-\infty, \Sigma(A) - \varepsilon]$, par définition de $\Sigma(A)$ et puisque A est minoré. En fait on a, plus explicitement,

$$q_R(v_n) = \sum_{\lambda_j(A) \leq \Sigma(A) - \varepsilon} \lambda_j(A) |\langle v_n, e_j \rangle|^2 \rightarrow 0$$

où les e_j sont des vecteurs propres associés aux valeurs propres $\lambda_j(A)$ situées sous $\Sigma(A) - \varepsilon$ (répétées en cas de multiplicité). Ainsi

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} q_A(v_n) = \liminf_{n \rightarrow \infty} q_{A\mathbf{1}_{] \Sigma(A) - \varepsilon, +\infty[}(A)}(v_n) \geq (\Sigma(A) - \varepsilon)$$

car $\langle v, A\mathbf{1}_{] \Sigma(A) - \varepsilon, +\infty[}(A)v \rangle \geq (\Sigma(A) - \varepsilon)\|v\|^2$ par le théorème spectral. Le résultat suit en prenant $\varepsilon \rightarrow 0$.

La preuve est exactement similaire si $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$, en utilisant cette fois la décomposition

$$A = A\mathbf{1}_{]-\infty, M]}(A) + A\mathbf{1}_{] M, +\infty[}(A)$$

et en prenant $M \rightarrow \infty$ à la fin. \square

5.2 Opérateurs compacts et à résolvante compacte

5.2.1 Opérateurs compacts

Rappelons qu'un opérateur K est dit compact lorsque l'image de la boule unité est compacte ou, dit autrement, lorsque $Kv_n \rightarrow 0$ fortement pour toute suite $v_n \rightarrow 0$ faiblement. Les opérateurs compacts forment un idéal bilatère $\mathcal{K}(\mathfrak{H})$ fermé de $\mathcal{B}(\mathfrak{H})$ dans lequel les opérateurs de rang fini sont denses [Rem18]. La fermeture de $\mathcal{K}(\mathfrak{H})$ signifie que si $\|K_n - B\| \rightarrow 0$ où tous les K_n sont compacts, alors B est automatiquement compact. Dire que c'est un idéal bilatère signifie que $BK, KB \in \mathcal{K}(\mathfrak{H})$ pour tout $K \in \mathcal{K}(\mathfrak{H})$ et tout $B \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$.

Un opérateur de rang fini est sous la forme

$$R = \sum_{j=1}^J |w_j\rangle\langle v_j|,$$

une notation avec les 'ket' et les 'bra' qui signifie

$$Rv = \sum_{j=1}^J \langle v_j, v \rangle w_j$$

où les v_j, w_j sont des vecteurs de \mathfrak{H} . En diagonalisant l'opérateur auto-adjoint R^*R on peut aussi se ramener au cas où les v_j forment un système orthonormé, auquel cas on obtient $w_j = Rv_j$, qui sont orthogonaux deux à deux, car $\langle Rv_j, Rv_k \rangle = \langle v_j, R^*Rv_k \rangle$.

Voici une conséquence du théorème 5.7.

Corollaire 5.11 (Opérateurs compacts). *Supposons $\dim(\mathfrak{H}) = +\infty$. Un opérateur auto-adjoint borné A est compact si et seulement si*

$$\sigma_{\text{ess}}(A) = \{0\}.$$

En particulier, A est alors diagonalisable dans une base orthonormée, avec des valeurs propres λ_j , qui tendent vers 0. Les valeurs propres non nulles sont toutes de multiplicité finie.

Si A n'est pas auto-adjoint, alors on peut écrire par la décomposition polaire $A = U|A|$ et appliquer le résultat précédent à $|A| = \sqrt{A^*A}$.

Démonstration. Si A est compact et $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, alors il existe une suite de Weyl (v_n) normalisée telle que $(A - \lambda)v_n \rightarrow 0$ et $v_n \rightarrow 0$. Alors $Av_n \rightarrow 0$, ce qui implique $\lambda v_n \rightarrow 0$ et n'est possible que si $\lambda = 0$, car $\|v_n\| = 1$ par hypothèse. Donc $\sigma_{\text{ess}}(A) \subset \{0\}$. Mais pour un opérateur borné on ne peut avoir $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$ en dimension infinie. En effet, tout point d'accumulation de valeurs propres appartient à $\sigma_{\text{ess}}(A)$ donc l'hypothèse $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$ implique

pour un opérateur borné que le spectre de A n'est composé que d'un nombre fini de valeurs propres de multiplicité finie. Mais alors $\dim(\mathfrak{H}) < \infty$ par le théorème spectral. Donc $\sigma_{\text{ess}}(A) \neq \emptyset$ et finalement $\sigma_{\text{ess}}(A) = \{0\}$.

Réciproquement, si $\sigma_{\text{ess}}(A) = \{0\}$, nous pouvons écrire

$$A = A\mathbf{1}_{[-\varepsilon, \varepsilon]}(A) + A\mathbf{1}_{\mathbb{R} \setminus [-\varepsilon, \varepsilon]}(A).$$

Comme A est borné, son spectre est aussi borné et l'hypothèse $\sigma_{\text{ess}}(A) = \{0\}$ implique alors que $\sigma(A) \cap \mathbb{R} \setminus [-\varepsilon, \varepsilon]$ est composé d'un nombre fini de valeurs propres de multiplicités finies. En particulier, l'opérateur $A\mathbf{1}_{\mathbb{R} \setminus [-\varepsilon, \varepsilon]}(A)$ est de rang fini. Comme

$$\|A\mathbf{1}_{[-\varepsilon, \varepsilon]}(A)\| \leq \varepsilon$$

nous voyons que A est une limite en norme d'une suite d'opérateurs de rang fini, et il est donc compact. \square

Nous donnons maintenant plusieurs exemples d'opérateurs compacts.

Opérateurs Hilbert-Schmidt

On se place sur $\mathfrak{H} = L^2(B, d\mu)$ pour un ensemble mesurable $B \subset \mathbb{R}^d$ quelconque et μ une mesure positive localement finie (par exemple $B = \mathbb{R}^d$ et μ la mesure de Lebesgue).

Définition 5.12 (Hilbert-Schmidt). *Un opérateur A sur $L^2(B, d\mu)$ est appelé Hilbert-Schmidt lorsqu'il est donné par un noyau intégral $a \in L^2(B \times B, d\mu \otimes \mu)$, c'est-à-dire par la formule*

$$(Au)(x) := \int_B a(x, y) u(y) d\mu(y). \quad (5.9)$$

Nous n'avons pas spécifié le domaine de définition de A car un opérateur Hilbert-Schmidt est toujours borné donc défini sur tout \mathfrak{H} . En effet, par l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a

$$|(Au)(x)|^2 \leq \|u\|_{L^2(B, d\mu)}^2 \int_B |a(x, y)|^2 d\mu(y) \quad (5.10)$$

qui implique bien, en intégrant par rapport à x , que A est borné avec

$$\|A\| \leq \|a\|_{L^2(B \times B, d\mu \otimes \mu)}.$$

Il est facile de vérifier que l'adjoint de A est aussi Hilbert-Schmidt, avec le noyau intégral $\overline{a(y, x)}$. Ainsi, A est auto-adjoint si et seulement si la fonction a vérifie $a(y, x) = \overline{a(x, y)}$ presque partout.

On doit penser que la fonction $a(x, y)$ est l'équivalent continu des coefficients M_{ij} d'une matrice en dimension finie. La formule (5.9) est alors l'équivalent continu de la formule $(Mv)_i = \sum_j M_{ij}v_j$ où la somme a été remplacée par une intégrale. Même en enlevant l'hypothèse que $a \in L^2(B \times B, d\mu \otimes \mu)$, il n'est cependant pas vrai que tout opérateur borné possède un tel noyau intégral a .

Proposition 5.13 (Compacité). *Un opérateur Hilbert-Schmidt est toujours compact.*

Démonstration. Par le théorème de Fubini, la fonction $y \mapsto a(x, y)$ appartient à $L^2(B, d\mu)$ pour presque tout x . Ainsi, si $u_n \rightharpoonup 0$ faiblement dans $L^2(B, d\mu)$, alors on a

$$(Au_n)(x) = \int_B a(x, y) u_n(y) d\mu(y) \rightarrow 0$$

pour presque tout x , par définition de la convergence faible de u_n dans la variable y . Donc $Au_n \rightarrow 0$ presque partout. Par ailleurs, l'estimée (5.10) fournit une domination indépendante de n car (u_n) est bornée dans $L^2(B, d\mu)$. Par convergence dominée on a alors $\|Au_n\|_{L^2(B, d\mu)} \rightarrow 0$. \square

Un opérateur de rang fini est toujours Hilbert-Schmidt. En utilisant les notations précédentes, on trouve que l'opérateur $A = |v\rangle\langle w|$ a le noyau $a(x, y) = v(x)\overline{w(y)}$.

Il est possible de caractériser les opérateurs Hilbert-Schmidt parmi les opérateurs compacts sur $\mathfrak{H} = L^2(B, d\mu)$, à partir de leurs valeurs singulières, c'est-à-dire les valeurs propres de A^*A .

Théorème 5.14 (Caractérisation des opérateurs Hilbert-Schmidt). *Soit A un opérateur compact sur $\mathfrak{H} = L^2(B, d\mu)$, avec B et μ comme précédemment. Alors A est Hilbert-Schmidt si et seulement si ses valeurs singulières $\mu_j(A) := \sqrt{\lambda_j(A^*A)}$ forment une suite de carré sommable, et on a dans ce cas*

$$a(x, y) = \sum_j (Au_j)(x)\overline{u_j(y)} \quad (5.11)$$

où la somme est convergente dans $L^2(B \times B, d\mu \otimes \mu)$ et où (u_j) est une base de vecteur propre pour l'opérateur A^*A . De plus,

$$\sum_j \mu_j(A)^2 = \int_B \int_B |a(x, y)|^2 d\mu(x) d\mu(y).$$

Démonstration. Soit A un opérateur compact. Après diagonalisation de A^*A , on peut écrire

$$A = \sum_j |Au_j\rangle\langle u_j|$$

où la somme $\sum_j |Au_j\rangle\langle u_j|$ est convergente en norme d'opérateur. Comme nous l'avons mentionné, chacun des opérateurs $|Au_j\rangle\langle u_j|$ est Hilbert-Schmidt, avec le noyau intégral $F_j(x, y) := (Au_j)(x)\overline{u_j(y)}$. On remarquera que les F_j sont orthogonaux deux à deux dans $L^2(B \times B, d\mu \otimes \mu)$ car les u_j le sont, et que $\|F_j\|_{L^2(B \times B)}^2 = \|Au_j\|_{L^2(B)}^2 = \mu_j(A)^2$.

Si $\sum_j \mu_j(A)^2 = \sum_j \|F_j\|^2 < \infty$, la fonction $a(x, y) := \sum_j F_j(x, y)$ est bien définie dans $L^2(B \times B, d\mu \otimes \mu)$. Ceci définit donc un opérateur Hilbert-Schmidt \tilde{A} de noyau a . Un calcul montre que \tilde{A} coïncide avec A sur la base des u_j , et ils doivent donc être égaux partout. En particulier, A est Hilbert-Schmidt.

Réciproquement, si A est Hilbert-Schmidt on peut écrire par l'inégalité de Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{j=1}^J F_j \right\|_{L^2(B \times B)}^2 &= \sum_{j=1}^J \mu_j(A)^2 = \sum_{j=1}^J \langle Au_j, Au_j \rangle \\ &= \sum_{j=1}^J \int_B \int_B \overline{(Au_j)(x)} a(x, y) u_j(y) d\mu(x) d\mu(y) \\ &= \int_{B \times B} \overline{\sum_{j=1}^J F_j(x, y)} a(x, y) d\mu \otimes \mu(x, y) \\ &\leq \|a\|_{L^2(B \times B)} \left\| \sum_{j=1}^J F_j \right\|_{L^2(B \times B)}. \end{aligned}$$

Donc

$$\sum_{j=1}^J \mu_j(A)^2 = \left\| \sum_{j=1}^J F_j \right\|_{L^2(B \times B)}^2 \leq \|a\|_{L^2(B \times B)}^2$$

et la somme converge. \square

L'ensemble des opérateurs Hilbert-Schmidt sur l'espace $L^2(B, d\mu)$ est noté $\mathfrak{S}^2(B, d\mu)$. C'est un espace de Hilbert qui est isométrique à $L^2(B \times B, d\mu \otimes \mu)$ lorsqu'il est muni de la norme

$$\|A\|_{\mathfrak{S}^2(B, d\mu)} := \|a\|_{L^2(B \times B, d\mu \otimes \mu)}$$

où a est le noyau intégral de A . On fera attention que $\mathfrak{S}^2(B, d\mu)$ n'est pas fermé pour la norme d'opérateur. En fait, $\mathfrak{S}^2(B, d\mu)$ contient tous les opérateurs de rang fini, donc sa fermeture est tout $\mathcal{K}(\mathfrak{H})$. Il se trouve que $\mathfrak{S}^2(B, d\mu)$ est aussi un idéal bilatère de $\mathcal{B}(\mathfrak{H})$, c'est-à-dire que $AM \in \mathfrak{S}^2(B, d\mu)$ pour tout opérateur borné M , lorsque $A \in \mathfrak{S}^2(B, d\mu)$.

Exercice 5.15 ($\mathfrak{S}^2(B, d\mu)$ est un idéal bilatère). *Soit A un opérateur borné sur $\mathfrak{H} = L^2(B, d\mu)$. Soient (e_n) et (f_n) deux bases orthonormées quelconques de \mathfrak{H} . Montrer l'égalité*

$$\sum_{n \geq 1} \|Ae_n\|^2 = \sum_{n, m \geq 1} |\langle f_m, Ae_n \rangle|^2 = \sum_{m \geq 1} \|A^* f_m\|^2, \quad (5.12)$$

où les termes peuvent être finis ou infinis. En déduire que A est un opérateur Hilbert-Schmidt si et seulement si ces séries sont toutes convergentes, avec

$$\|A\|_{\mathfrak{S}^2(B, d\mu)}^2 := \sum_{n \geq 1} \|Ae_n\|^2$$

pour toute base orthonormée. Montrer de cette manière que AM et MA sont Hilbert-Schmidt lorsque A l'est et M est un opérateur borné quelconque.

Voici un exemple particulièrement important d'opérateur Hilbert-Schmidt.

Proposition 5.16. *Lorsque $f, g \in L^2(\mathbb{R}^d)$, les opérateurs*

$$A_1 = f(x)g(-i\nabla), \quad A_2 = g(-i\nabla)f(x) \quad (5.13)$$

définis préalablement sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ sont fermables et leurs fermetures sont Hilbert-Schmidt sur tout $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, avec

$$\|\overline{A_1}\|_{\mathfrak{S}^2} = \|\overline{A_2}\|_{\mathfrak{S}^2} = (2\pi)^{-d/2} \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \|g\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad (5.14)$$

et les noyaux intégraux correspondants

$$a_1(x, y) = (2\pi)^{-d/2} f(x)\check{g}(x - y), \quad a_2(x, y) = (2\pi)^{-d/2} \check{g}(x - y)f(y).$$

On rappelle que $g(-i\nabla)$ est l'opérateur de multiplication par la fonction $g(k)$ en Fourier, ce qui correspond bien à la convolution par la fonction $(2\pi)^{-d/2}\check{g}$ en espace direct. Dans (5.13) nous interprétons $f(x)$ comme l'opérateur M_f de multiplication par la fonction f . Les opérateurs A_1 et A_2 ont déjà été considérés à la section 1.6.5.

Comme les opérateurs $f(x)$ et $g(-i\nabla)$ ne sont pas en général bornés, donc pas définis sur tout $L^2(\mathbb{R}^d)$, on doit comme dans l'énoncé commencer par définir A_1 et A_2 sur un sous-espace approprié et ensuite montrer qu'ils admettent une unique extension bornée à tout $L^2(\mathbb{R}^d)$. Nous voyons donc qu'il peut arriver qu'un produit d'opérateurs non bornés soit finalement borné! Pour simplifier les notations, nous appellerons souvent dans la suite $A_1 = f(x)g(-i\nabla)$ et $A_2 = g(-i\nabla)f(x)$ les opérateurs Hilbert-Schmidt définis sur tout $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Démonstration. Pour toute fonction $u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$, on a $fu \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^2(\mathbb{R}^d)$ car $u \in L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d)$. Sa transformée de Fourier appartient à

$$\widehat{fu} \in L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Ceci garantit que $fu \in D(g(-i\nabla))$, c'est-à-dire $g\widehat{fu} \in L^2(\mathbb{R}^d)$, puisque $\widehat{fu} \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$. Ainsi A_2 est bien défini sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$. Un calcul explicite montre ensuite que

$$(A_2u)(x) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \check{g}(x - y)f(y)u(y) dy$$

pour tout $u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$. Or le noyau intégral $a_2(x, y) = (2\pi)^{d/2} \check{g}(x - y) f(y)$ appartient à $L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ et définit un opérateur Hilbert-Schmidt. Comme cet opérateur est borné, par le théorème 5.14, c'est la fermeture de A_2 , défini au préalable sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$. L'argument est le même pour A_1 . \square

Opérateurs $f(x)g(-i\nabla)$ pour $f, g \in L^p(\mathbb{R}^d)$

Nous avons montré que les opérateurs $f(x)g(-i\nabla)$ et $g(-i\nabla)f(x)$ étaient compacts (en fait Hilbert-Schmidt) sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ dès lors que $f, g \in L^2(\mathbb{R}^d)$. L'exposant 2 pour f et g n'est pas relié au fait que nous travaillons dans l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^d)$. Il se trouve que ces opérateurs sont bien définis pour tout $f, g \in L^p(\mathbb{R}^d)$ avec $p \in [2; \infty]$ et qu'ils sont compacts pour $p < \infty$.

Théorème 5.17 (Compacité de $f(x)g(-i\nabla)$). *Lorsque*

$$f, g \in L^p(\mathbb{R}^d) \quad \text{avec} \quad 2 \leq p \leq \infty,$$

les opérateurs

$$A_1 = f(x)g(-i\nabla) \quad \text{et} \quad A_2 = g(-i\nabla)f(x)$$

définis au préalable sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ sont fermables et leurs fermetures sont bornées sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^d)$ avec

$$\|\overline{A_1}\| = \|\overline{A_2}\| \leq (2\pi)^{-d/p} \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}. \quad (5.15)$$

De plus, ces opérateurs sont compacts quand $p \in [2; +\infty[$ ou quand $p = +\infty$ et f et g tendent tous les deux vers 0 à l'infini.

Les opérateurs A_1 et A_2 ont les noyaux intégraux respectifs formels

$$a_1(x, y) = (2\pi)^{-d/2} f(x) \check{g}(x - y), \quad a_2(x, y) = (2\pi)^{-d/2} \check{g}(x - y) f(y)$$

mais il faut faire attention que \check{g} est en principe une distribution tempérée.

Démonstration. Soient $u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $p \in [2; +\infty]$. Alors, par l'inégalité de Hölder, on a $fu \in L^q(\mathbb{R}^d)$ avec

$$\|fu\|_{L^q(\mathbb{R}^d)} \leq \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

et $1/q = 1/2 + 1/p$. Comme $q = 2p/(p + 2) \in [1; 2[$, ceci implique que $\widehat{fu} \in L^{q'}(\mathbb{R}^d)$ où $1/q' + 1/q = 1$. On rappelle en effet que si $\varphi \in L^r(\mathbb{R}^d)$ avec $1 \leq r \leq 2$, alors $\widehat{\varphi} \in L^{r'}(\mathbb{R}^d)$ où $1/r + 1/r' = 1$ avec

$$\|\widehat{\varphi}\|_{L^{r'}(\mathbb{R}^d)} \leq (2\pi)^{-\frac{d(2-r)}{2r}} \|\varphi\|_{L^r(\mathbb{R}^d)} \quad (5.16)$$

(inégalité de Hausdorff-Young). On a donc

$$\|\widehat{fu}\|_{L^{q'}(\mathbb{R}^d)} \leq (2\pi)^{-\frac{d}{p}} \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

car $(2-q)/2q = 1/p$. Par ailleurs on a aussi $\widehat{fu} \in L^2(\mathbb{R}^d)$ car $fu \in L^p(\mathbb{R}^d) \cap L^q(\mathbb{R}^d) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$. Ainsi $fu \in D(g(-i\nabla))$ car, à nouveau par l'inégalité de Hölder,

$$\|g \widehat{fu}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \|g\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|\widehat{fu}\|_{L^{q'}(\mathbb{R}^d)} \leq (2\pi)^{-\frac{d}{p}} \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)},$$

en notant que $1/2 = 1/p + 1/q'$. En conclusion nous avons montré que A_2 est bien défini sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et satisfait l'estimée

$$\|A_2 u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq (2\pi)^{-\frac{d}{p}} \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

sur cet espace. Ceci montre que A_2 est fermable et que sa fermeture est un opérateur borné sur tout $L^2(\mathbb{R}^d)$, qui vérifie comme nous voulions

$$\|\overline{A_2}\| \leq (2\pi)^{-\frac{d}{p}} \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}.$$

L'argument est valable pour tout $2 \leq p \leq \infty$ et il est similaire pour A_1 .

Montrons maintenant que $\overline{A_2}$ est compact lorsque $2 \leq p < \infty$ ou si $p = +\infty$ mais qu'on ajoute l'hypothèse supplémentaire que $f, g \rightarrow 0$ à l'infini. Pour cela il suffit de remarquer que l'on peut dans tous ces cas approcher f et g par des suites (f_k) et (g_k) de fonctions dans $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ qui convergent vers f et g dans $L^p(\mathbb{R}^d)$. On a alors, par l'argument précédent,

$$\begin{aligned} & \|g(-i\nabla)f(x) - g_k(-i\nabla)f_k(x)\| \\ & \leq \|(g - g_k)(-i\nabla)f(x)\| + \|g_k(-i\nabla)(f - f_k)(x)\| \\ & \leq (2\pi)^{-\frac{d}{p}} \left(\|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g - g_k\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} + \|f - f_k\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g_k\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \right) \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Or chacun des opérateurs $g_k(-i\nabla)f_k(x)$ est Hilbert-Schmidt donc compact par le théorème 5.14. Ainsi, l'opérateur $g(-i\nabla)f(x)$ est aussi compact, comme limite en norme d'une suite d'opérateurs compacts. Pour A_1 on peut utiliser par exemple que $A_1 = \mathcal{F}^{-1}f(-i\nabla)g(x)\mathcal{F}$ qui est compact car la transformée de Fourier est unitaire. \square

Remarque 5.18. *De façon similaire au théorème 5.14, il est possible de prouver [Sim79, Chap. 4] que*

$$\|(\mu_j(A_1))_j\|_{\ell^p} = \|(\mu_j(A_2))_j\|_{\ell^p} \leq (2\pi)^{-\frac{d}{p}} \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}$$

qui est une inégalité plus forte que (5.15).

Remarque 5.19. *Même si la fonction $x \mapsto |x|^{-d/p}$ n'est pas dans $L^p(\mathbb{R}^d)$, il se trouve que l'opérateur $f(x)g(-i\nabla)$ reste compact si on remplace f ou g par $|x|^{-d/p}$. Ceci suit de l'inégalité de Hardy-Littlewood-Sobolev [LL01] qui stipule que*

$$\|f * |x|^{-s}\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \leq C \|f\|_{L^q(\mathbb{R}^d)} \quad (5.17)$$

lorsque

$$1 < p, q < \infty \quad \text{et} \quad 1 + \frac{1}{p} = \frac{1}{q} + \frac{s}{d},$$

et qui permet de remplacer l'inégalité de Hölder utilisée dans notre argument.

5.2.2 Opérateurs à résolvante compacte

Définition 5.20 (Opérateurs à résolvante compacte). *On dit qu'un opérateur auto-adjoint A est à résolvante compacte si $(A + i)^{-1}$ est compact.*

Pour tout $\lambda \notin \sigma(A)$, on a par le calcul fonctionnel

$$\frac{A + i}{A - \lambda} = 1 + (\lambda + i)(A - \lambda)^{-1}$$

qui est un opérateur borné, de sorte que

$$(A - \lambda)^{-1} = (A + i)^{-1} \underbrace{\frac{A + i}{A - \lambda}}_{\in \mathcal{B}(\mathfrak{H})} \quad (5.18)$$

est compact également. Cet argument montre qu'il est équivalent de demander que $(A - \lambda)^{-1}$ soit compact pour tout ou pour un $\lambda \notin \sigma(A)$.

Voici alors un corollaire du même type que pour les opérateurs compacts.

Corollaire 5.21 (Opérateurs à résolvante compacte). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$, avec $\dim(\mathfrak{H}) = +\infty$. Alors A est à résolvante compacte si et seulement si*

$$\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset.$$

Dans ce cas, le spectre de A est composé d'une suite (λ_n) de valeurs propres de multiplicité finie qui vérifient

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\lambda_n| = +\infty.$$

En particulier, A est diagonalisable dans une base orthonormée.

Démonstration. Supposons que $(A + i)^{-1}$ est compact et considérons $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, avec une suite de Weyl $v_n \rightarrow 0$ associée. Alors

$$0 \leftarrow (A - \lambda)v_n = (A + i)v_n - (\lambda + i)v_n$$

de sorte que, par continuité de $(A + i)^{-1}$,

$$v_n - (\lambda + i)(A + i)^{-1}v_n \rightarrow 0$$

fortement. Or $v_n \rightarrow 0$ et la compacité de $(A + i)^{-1}$ implique alors que $(A + i)^{-1}v_n \rightarrow 0$ fortement, ce qui implique $v_n \rightarrow 0$ et contredit $\|v_n\| = 1$. Ainsi, $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$.

Réciproquement, si $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$ le spectre de A n'est composé que de valeurs propres isolées de multiplicité finie, qui doivent nécessairement s'accumuler en $\pm\infty$ sinon \mathfrak{H} serait de dimension finie par le théorème spectral. Soit dans ce cas $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \sigma(A)$. Par le calcul fonctionnel et la remarque 5.9, le spectre de l'opérateur auto-adjoint $(A - \lambda)^{-1}$ est composé d'une suite de valeurs propres de multiplicité finie, qui tendent vers 0. Ceci signifie que $\sigma_{\text{ess}}((A - \lambda)^{-1}) = \{0\}$ et donc, d'après le corollaire 5.11, que $(A - \lambda)^{-1}$ est compact. \square

Application : Laplacien sur $]0, 1[$

Rappelons que le Laplacien A_V sur $]0, 1[$ a été construit à la section 2.8.2, pour tout V sous-espace isotrope de la matrice (2.15). Il est défini par

$$A_V v = -v''$$

sur le domaine

$$D(A_V) = \left\{ v \in H^2(]0, 1[) : (v(0), v'(0), v(1), v'(1)) \in V \right\}$$

et il est auto-adjoint si et seulement si $\dim(V) = 2$. Plus précisément, dans le cas où $\dim(V) = 2$, nous avons vu au théorème 2.46 que

$$\boxed{D(A_V) = H_0^2(]0, 1[) + \text{vect}(v_1, v_2)} \quad (5.19)$$

où $v_1, v_2 \in H^2(]0, 1[)$ sont telles que $(v_i(0), v_i'(0), v_i(1), v_i'(1))$ forment une base de V .

Théorème 5.22 (Spectre du Laplacien sur $]0, 1[$). *L'opérateur A_V est à résolvante compacte et son spectre est composé d'une suite de valeurs propres de multiplicité finie, qui tendent vers $+\infty$. De plus, A_V a au plus deux valeurs propres strictement négatives (comptées avec multiplicité), c'est-à-dire $\mathbb{1}_{]-\infty, 0[}(A_V)$ est de rang inférieur ou égal à 2.*

Démonstration. Considérons une suite $v_n \rightarrow 0$ faiblement dans $L^2(]0, 1[)$ et posons $w_n := (A_V + i)^{-1}v_n$ dont nous voulons montrer que $w_n \rightarrow 0$ fortement. Comme $(A_V + i)^{-1}$ est un opérateur borné, w_n est bornée et on a même $w_n \rightarrow 0$ faiblement. Or $-w_n'' + iw_n = v_n$, ce qui montre que w_n'' est bornée dans $L^2(]0, 1[)$. Par le lemme A.3 de régularité elliptique sur un intervalle, nous en déduisons que w_n est bornée dans $H^2(]0, 1[)$ et, finalement, que $w_n \rightarrow 0$ fortement dans $\mathfrak{H} = L^2(]0, 1[)$, d'après la compacité de l'injection $H^2(]0, 1[) \hookrightarrow L^2(]0, 1[)$ (théorème A.16 de Rellich-Kondrachov). Ceci montre bien la compacité de $(A_V + i)^{-1}$.

Montrons finalement que $\mathbb{1}_{]-\infty, 0[}(A_V)$ est de rang au plus 2, ce qui impliquera *a fortiori* que A_V est minoré, et donc que les valeurs propres doivent s'accumuler en $+\infty$. Par l'absurde, si $\mathbb{1}_{]-\infty, 0[}(A_V)$ est de rang supérieur ou égal à trois, alors il en est de même pour $\mathbb{1}_{]-M, 0[}(A_V)$ lorsque M est assez grand. Mais dans ce cas l'image de $\mathbb{1}_{]-M, 0[}(A_V)$ (qui est incluse dans $D(A_V)$ car M est fini) doit intersecter $H_0^2(]0, 1[)$, d'après (5.19). Soit alors $v \neq 0$ dans cette intersection. Comme $v \in H_0^2(]0, 1[)$ nous avons vu que les termes de bord s'en vont dans l'intégration par parties, de sorte que

$$\langle v, A_V v \rangle = \int_0^1 |v'(t)|^2 dt \geq 0.$$

Ceci contredit le fait que $v \in \mathbb{1}_{]-M, 0[}(A_V)\mathfrak{H}$ car sur cet espace, on a $\langle v, A_V v \rangle < 0$ pour tout $v \neq 0$. \square

Exemple 5.23 (Spectre du Laplacien de Dirichlet & de Neumann). *Dans le cas du Laplacien de Dirichlet, correspondant à la condition $u(0) = u(1) = 0$, les fonctions propres doivent résoudre l'équation*

$$-f'' = \lambda f$$

où $\lambda \geq 0$ puisque le spectre est inclus dans \mathbb{R}^+ . En écrivant $\lambda = (\pi k)^2$, on trouve $f(x) = \alpha \cos(\pi k x) + \beta \sin(\pi k x)$ avec les conditions au bord $\alpha = 0 = \alpha \cos(\pi k) + \beta \sin(\pi k)$. Ceci implique que $k \in \mathbb{Z}$, donc que (avec une notation simplifiée évidente pour le Laplacien de Dirichlet)

$$\sigma((-d^2/dx^2)_{\text{Dir}}) = \{\pi^2 k^2, k \geq 1\}$$

avec les fonctions propres

$$u_{\text{Dir},k}(x) = \sin(\pi k x), \quad k \geq 1.$$

De la même façon, on montre pour la condition de Neumann $u'(0) = u'(1) = 0$ que

$$\sigma((-d^2/dx^2)_{\text{Neu}}) = \{\pi^2 k^2, k \geq 0\}$$

avec les fonctions propres

$$u_{\text{Neu},k}(x) = \cos(\pi k x), \quad k \geq 0.$$

Les deux opérateurs ont donc le même spectre, si l'on excepte la valeur propre 0. Toutes les valeurs propres sont de multiplicité 1.

Le comportement des valeurs propres du Laplacien avec condition au bord de Robin (en fonction du paramètre $\theta \in [0, 1[$) est étudié plus bas dans l'exercice 5.56.

Application : Laplacien sur un ouvert borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$

L'argument est similaire sur tout ouvert borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, avec la différence que nous ne pouvons travailler dans $H^2(\Omega)$ puisque le domaine n'est pas toujours inclus dans cet espace, par exemple en cas d'angles rentrants (section 3.3.4). Une autre différence est que $(-\Delta)^{\min}$ admet des extensions auto-adjointes non bornées inférieurement, une pathologie que nous ne discuterons pas plus en détails, puisque nous ne traitons ici que du Laplacien de Robin.

Théorème 5.24 (Spectre du Laplacien sur $\Omega \subset \mathbb{R}^d$). *Soit Ω un ouvert borné de \mathbb{R}^d dont la frontière est Lipschitzienne. Le Laplacien de Robin $(-\Delta)_{\text{Rob},\theta}$ défini à la section 3.3.4 est à résolvante compacte et son spectre est composé d'une suite de valeurs propres de multiplicité finie, qui tend vers $+\infty$.*

Démonstration. Nous pouvons travailler dans l'espace d'énergie et tirer partie de la compacité de l'injection $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$. La forme quadratique du Laplacien de Robin est donnée par (3.23). Prenons comme avant $w_n := ((-\Delta)_{\text{Rob},\theta} + C)^{-1}v_n$ où $v_n \rightharpoonup 0$ dans $L^2(\Omega)$ et avec C assez grand. Alors $-\Delta w_n + Cw_n = v_n$ ce qui, en prenant le produit scalaire contre $w_n \in H^1(\Omega)$, implique

$$\int_{\Omega} |\nabla w_n|^2 + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |w_n|^2 + C \int_{\Omega} |w_n|^2 \leq \|v_n\| \|w_n\| = O(1).$$

Ceci prouve que w_n est bornée dans $H^1(\Omega)$, ce qui fournit la compacité attendue. \square

Exemple 5.25 (Dirichlet & Neumann sur un hypercube). *Plaçons-nous dans le cube unité $C_1 :=]0, 1[^d \subset \mathbb{R}^d$ en dimension $d \geq 1$. Alors une base de fonctions propres pour les Laplaciens de Dirichlet et de Neumann est fournie par les produits tensoriels des fonctions propres dans chaque dimension. C'est-à-dire par les*

$$\prod_{j=1}^d \sin(\pi k_j x_j), \quad k_j \geq 1, \quad \text{et les} \quad \prod_{j=1}^d \cos(\pi k_j x_j), \quad k_j \geq 0,$$

respectivement. En particulier, le spectre vaut

$$\sigma((-\Delta)_{\text{Dir}}) = \pi^2 \left\{ \sum_{j=1}^d k_j^2, \quad k_j \geq 1 \right\} \quad \text{sur } C_1 =]0, 1[^d,$$

et

$$\sigma((-\Delta)_{\text{Neu}}) = \pi^2 \left\{ \sum_{j=1}^d k_j^2, \quad k_j \geq 0 \right\} \quad \text{sur } C_1 =]0, 1[^d.$$

Les deux spectres diffèrent plus qu'en dimension un. Par exemple, $0, \pi^2, \dots, (d-1)\pi^2$ sont dans le spectre du Laplacien de Neumann mais pas dans celui du Laplacien de Dirichlet.

Sur un cube quelconque $C \subset \mathbb{R}^d$, le spectre ne dépend pas de la position du cube car le Laplacien est invariant par translations. Par ailleurs, en effectuant une dilatation on peut toujours se ramener au cas du cube unité. Ainsi, on trouve que les spectres sur un cube quelconque valent

$$\sigma((-\Delta)_{\text{Dir}}) = \frac{\pi^2}{|C|^{2/d}} \left\{ \sum_{j=1}^d k_j^2, \quad k_j \geq 1 \right\} \quad \text{sur un cube de volume } |C|,$$

et

$$\sigma((-\Delta)_{\text{Neu}}) = \frac{\pi^2}{|C|^{2/d}} \left\{ \sum_{j=1}^d k_j^2, \quad k_j \geq 0 \right\} \quad \text{sur un cube de volume } |C|,$$

où $|C|^{1/d}$ est la longueur de l'arête du cube.

Exercice 5.26. Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné. Montrer que la première valeur propre du Laplacien de Robin tend vers $-\infty$ quand $\theta \rightarrow 1^-$. En supposant que $d \geq 2$ et que Ω est assez lisse, construire une extension de $(-\Delta)^{\min}$ qui n'est pas bornée inférieurement (utiliser des conditions de Robin sur différentes parties de $\partial\Omega$, avec des $\theta_n \rightarrow 1^-$).

Application : cas d'un potentiel confinant

Nous avons finalement un résultat similaire dans le cas d'un potentiel qui tend vers l'infini à l'infini.

Théorème 5.27 (Spectre des opérateurs de Schrödinger avec potentiel confinant). Soit $V = V_+ - V_-$ avec $V_- \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ où p satisfait (3.15) et $V_+ \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$ tel que

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V_+(x) = +\infty.$$

Soit $H = -\Delta + V$ la réalisation de Friedrichs construite au théorème 3.26. Alors H a une résolvante compacte. Son spectre est composé de valeurs propres de multiplicité finie, qui tendent vers $+\infty$. En particulier, H est diagonalisable dans une base orthonormée.

Démonstration. Comme avant, nous avons pour $w_n = (H + C)^{-1}v_n$ avec $v_n \rightharpoonup 0$

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla w_n|^2 + \int_{\mathbb{R}^d} (V + C)|w_n|^2 \leq C.$$

Ceci montre que (w_n) est bornée dans l'espace d'énergie \mathcal{V} introduit en (3.17). En particulier (w_n) est bornée dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ donc converge fortement localement vers 0, et $\sqrt{V_+}w_n$ est bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. En écrivant

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |w_n|^2 &= \int_{B_R} |w_n|^2 + \int_{(B_R)^c} |w_n|^2 \\ &\leq \int_{B_R} |w_n|^2 + \frac{1}{\|V_+\|_{L^\infty((B_R)^c)}} \int_{(B_R)^c} V_+ |w_n|^2 \end{aligned}$$

nous en déduisons que $w_n \rightarrow 0$ fortement car le premier terme tend vers 0 pour tout R fixé et le second est petit lorsque R est assez grand, puisque $V_+ \rightarrow \infty$ par hypothèse. \square

Exemple 5.28 (Diagonalisation de l'oscillateur harmonique). Calculons le spectre de l'oscillateur harmonique $H = -d^2/dx^2 + x^2$, dont le domaine a été déterminé plus haut au théorème 3.27. L'idée est de remarquer que (au moins formellement [RS75, Thm. X.25]),

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 = \left(\frac{d}{dx} + x\right) \left(-\frac{d}{dx} + x\right) - 1 = \left(-\frac{d}{dx} + x\right) \left(\frac{d}{dx} + x\right) + 1.$$

Du point de vue de l'énergie, ceci s'écrit

$$\langle u, Hu \rangle = \int_{\mathbb{R}} |u'(x) + xu(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}} |u(x)|^2 dx$$

où chaque terme fait bien sens dans $Q(H)$. Nous pouvons annuler le premier terme en résolvant l'équation $f' + xf = 0$, c'est-à-dire en prenant

$$f_0(x) = \pi^{-1/2} e^{-x^2/2}$$

qui engendre donc $\ker(H - 1)$. Ainsi, la première valeur propre est 1 et elle est non dégénérée.

Du point de vue physique, les opérateurs $a = (-d/dx + x)/\sqrt{2}$ et $a^* = (d/dx + x)/\sqrt{2}$ satisfont la relation de commutation (formelle)

$$aa^* - a^*a = 1$$

qui permet d'identifier $L^2(\mathbb{R})$ à l'espace de Fock bosonique à un mode

$$\mathcal{F}(\mathbb{C}) = \mathbb{C} \oplus \bigoplus_{n \geq 1} \mathbb{C}^{\otimes n},$$

dans lequel H devient $2a^*a + 1$ où a^*a est l'opérateur de nombre et f_0 est le vide. Comme on génère tous les vecteurs de l'espace de Fock en appliquant l'opérateur de création a^* , ceci suggère d'introduire la suite de fonctions

$$f_n = (a^*)^n f_0 = 2^{-\frac{n}{2}} \left(\frac{d}{dx} + x \right)^n f_0.$$

Un calcul montre en effet que f_n est un vecteur propre de H de valeur propre $2n + 1$. Il s'avère que

$$f_n(x) = P_n(x) e^{-x^2/2}.$$

où les P_n sont les polynômes de Hermite, dont on sait qu'ils forment une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R}, e^{-x^2} dx)$, c'est-à-dire les (f_n) forment une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R})$. Nous avons donc diagonalisé H et avons prouvé que

$$\sigma(H) = 2\mathbb{N} + 1.$$

En dimension $d \geq 2$, nous obtenons une base de $L^2(\mathbb{R}^d)$ en formant les produits tensoriels des f_n . Plus précisément,

$$f_{n_1}(x_1) \cdots f_{n_d}(x_d)$$

est un vecteur propre associé à la valeur propre

$$2(n_1 + \cdots + n_d) + d.$$

Le spectre est donc égal à

$$\sigma(H) = 2\mathbb{N} + d.$$

La multiplicité de la valeur propre $2n + 1$ est le nombre de façons que n peut s'écrire comme une somme d'entiers $n = n_1 + \dots + n_d$, qui vaut

$$\frac{(n + d - 1)!}{n!(d - 1)!}.$$

5.3 Théorie de Weyl sur l'invariance du spectre essentiel

Dans cette section nous étudions à quelle condition sur B on a $\sigma_{\text{ess}}(A + B) = \sigma_{\text{ess}}(A)$.

5.3.1 Perturbations laissant le spectre essentiel invariant

Nous avons vu au chapitre 3 la notion de perturbations (infinitésimalement) relativement bornées. Nous introduisons ici une notion plus forte, sous laquelle le spectre essentiel sera inchangé.

Définition 5.29 (Perturbation relativement compactes). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur $D(A) \subset \mathfrak{H}$ et B un opérateur symétrique sur $D(A)$. On dit que B est A -compact lorsque l'opérateur*

$$B(A + i)^{-1}$$

est compact (donc borné) dans \mathfrak{H} .

Pour tout $z \notin \sigma(A)$ on peut écrire d'après (5.18)

$$B(A - z)^{-1} = B(A + i)^{-1} (1 + (z + i)(A - \lambda)^{-1})$$

de sorte que B est A -compact si et seulement si $B(A - z)^{-1}$ est compact pour un ou pour tout $z \notin \sigma(A)$.

Lemme 5.30 (A -compact \implies infinitésimalement A -borné). *Si B est un opérateur symétrique A -compact, alors B est infinitésimalement A -borné, ce qui signifie que pour tout ε , il existe C_ε tel que*

$$\|Bv\| \leq \varepsilon \|Av\| + C_\varepsilon \|v\|, \quad \forall v \in D(A).$$

Démonstration. Nous écrivons

$$B(A + i\mu)^{-1} = B(A + i)^{-1} \frac{A + i}{A + i\mu}.$$

Pour $\mu \geq 1$, nous introduisons $f_\mu(x) = (x + i)/(x + i\mu)$, et remarquons que

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad |f_\mu(x)| = \left| \frac{x + i}{x + i\mu} \right| = \left(\frac{x^2 + 1}{x^2 + \mu^2} \right)^{1/2} \leq 1$$

de sorte que, par le calcul fonctionnel (assertion (ii) du théorème 4.13),

$$\|f_\mu(A)\| = \left\| \frac{A+i}{A+i\mu} \right\| \leq 1.$$

Par ailleurs, la fonction $f_\mu(x)$ converge vers 0 pour tout x fixé, quand $\mu \rightarrow \infty$. Ceci montre, toujours par le calcul fonctionnel (assertion (v) du théorème 4.13), que

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} \frac{A+i}{A+i\mu} v = \lim_{\mu \rightarrow \infty} \frac{A-i}{A-i\mu} v = 0$$

pour tout $v \in \mathfrak{H}$ fixé. Comme $B(A+i)^{-1}$ est compact, nous pouvons écrire $B(A+i)^{-1} = C + R$ où $\|C\| \leq \varepsilon$ et $R = \sum_{j=1}^J |w_j\rangle\langle v_j|$ est de rang fini. Alors

$$Rf_\mu(A) = \sum_{j=1}^J |w_j\rangle\langle \overline{f_\mu(A)}v_j|$$

de sorte que

$$\left\| R \frac{A+i}{A+i\mu} \right\| \leq \sum_{j=1}^J \|w_j\| \|\overline{f_\mu(A)}v_j\|$$

où $\|\overline{f_\mu(A)}v_j\| \rightarrow 0$ pour tout $j = 1, \dots, J$, comme expliqué précédemment. Par ailleurs

$$\left\| C \frac{A+i}{A+i\mu} \right\| \leq \|C\| \leq \varepsilon.$$

Par un ‘argument en $\varepsilon/2$ ’, ceci permet de conclure que

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} \|B(A+i\mu)^{-1}\| = \lim_{\mu \rightarrow \infty} \left\| B(A+i)^{-1} \frac{A+i}{A+i\mu} \right\| = 0.$$

Comme

$$\|Bv\| = \|B(A+i\mu)^{-1}(A+i\mu)v\| \leq \|B(A+i\mu)^{-1}\| (\|Av\| + \mu\|v\|),$$

où le coefficient de $\|Av\|$ tend vers 0 quand $\mu \rightarrow \infty$, ceci implique le résultat. \square

Voici maintenant un résultat qui fournit l’invariance du spectre essentiel lorsque B est A -compact.

Théorème 5.31 (Weyl). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$ et B un opérateur symétrique qui est A -compact. Alors $A+B$ est auto-adjoint sur $D(A)$ et*

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

Démonstration. L'auto-adjonction de $A + B$ sur $D(A)$ suit du théorème de Rellich-Kato et du lemme 5.30. Si $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, il existe une suite $v_n \in D(A)$ telle que $(A - \lambda)v_n \rightarrow 0$ et $v_n \rightarrow 0$. Alors

$$(A + B - \lambda)v_n = (A - \lambda)v_n - B(A + i)^{-1}(A + i)v_n$$

converge vers 0 fortement car $(A + i)v_n = (A - \lambda)v_n + (\lambda + i)v_n$ tend vers 0 faiblement et $B(A + i)^{-1}$ est compact. Ainsi $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A + B)$ et nous avons montré que $\sigma_{\text{ess}}(A) \subset \sigma_{\text{ess}}(A + B)$.

L'inclusion inverse suit en échangeant les rôles de A et $A + B$ mais il faut d'abord montrer que $-B$ est $A + B$ compact. Ceci suit de la relation

$$A + B + i\mu = (1 + B(A + i\mu)^{-1})(A + i\mu)$$

qui implique que

$$B(A + B + i\mu)^{-1} = B(A + i\mu)^{-1}(1 + B(A + i\mu)^{-1})^{-1}$$

est bien compact. L'opérateur à droite est inversible dès que $\|B(A + i\mu)^{-1}\| < 1$, ce qui est le cas pour μ assez grand d'après la preuve du lemme 5.30. \square

Remarque 5.32. *Le caractère auto-adjoint des opérateurs considérés est important pour la stabilité du spectre essentiel. À l'exercice 5.53 nous donnons l'exemple d'un opérateur non auto-adjoint borné, auquel on ajoute un opérateur de rang fini (donc compact), mais qui modifie énormément le spectre essentiel.*

Le théorème 5.31 que nous avons présenté est le plus connu et probablement le plus simple, mais il existe plusieurs autres versions du même type. Par exemple, au lieu de la compacité de $B(A + i)^{-1}$, nous pouvons demander celle de $(A + B + i)^{-1} - (A + i)^{-1}$. Comme

$$(A + B + i)^{-1} - (A + i)^{-1} = -(A + B + i)^{-1}B(A + i)^{-1}$$

où $(A + B + i)^{-1}$ est borné, c'est une hypothèse plus faible que précédemment.

Théorème 5.33 (Weyl II). *Soient A et A' deux opérateurs quelconques sur leur domaines respectifs $D(A), D(A') \subset \mathfrak{H}$. S'il existe $z \notin \sigma(A) \cup \sigma(A')$ tel que*

$$(A - z)^{-1} - (A' - z)^{-1} \quad \text{soit compact,}$$

alors

$$\boxed{\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma_{\text{ess}}(A')}.$$

Démonstration. Le spectre essentiel de $(A - z)^{-1}$ et de $(A' - z)^{-1}$ a été calculé en fonction de ceux de A et A' à la remarque 5.9 et il est caractérisé avec les suites de Weyl comme au théorème 5.7. La preuve est alors la même qu'au théorème 5.31. Si $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, alors il existe une suite (v_n) telle que $\|v_n\| = 1$

et $((A - z)^{-1} - (\lambda - z)^{-1})v_n \rightarrow 0$. La compacité de $(A - z)^{-1} - (A' - z)^{-1}$ implique alors que

$$((A' - z)^{-1} - (\lambda - z)^{-1})v_n \rightarrow 0,$$

ce qui montre que $(\lambda - z)^{-1} \in \sigma_{\text{ess}}((A' - z)^{-1})$, et donc que $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A')$. On obtient l'autre inclusion en échangeant les rôles de A et A' . \square

Il existe également une version un peu plus compliquée faisant intervenir uniquement les formes quadratiques.

Théorème 5.34 (Weyl III). *Soit A un opérateur auto-adjoint coercif sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Soit b une forme quadratique sur $Q(A)$, telle que*

$$|b(v)| \leq \eta q_A(v) + C \|v\|^2, \quad \forall v \in Q(A), \quad (5.20)$$

pour un réel $0 \leq \eta < 1$. Soit A' l'unique opérateur auto-adjoint associé à la forme quadratique fermée $v \mapsto q_A(v) + b(v)$ sur $Q(A)$ (théorème KLMN 3.23). Si b est continue pour la topologie faible de $Q(A)$, c'est-à-dire

$$\boxed{\lim_{n \rightarrow \infty} b(v_n) = b(v)} \quad (5.21)$$

pour toute suite $v_n \rightharpoonup v$ dans $Q(A)$, alors

$$\boxed{\sigma_{\text{ess}}(A') = \sigma_{\text{ess}}(A)}.$$

Démonstration. Posons $B = A' - A$. Cet opérateur n'est pas bien défini sur \mathfrak{H} car A et A' peuvent avoir des domaines très différents. Par contre il l'est sur $Q(A)$, à condition d'interpréter Av et $A'v$ comme des formes linéaires de $Q(A)'$ pour tout $v \in Q(A)$. En particulier, l'opérateur

$$K = A^{-1/2}BA^{-1/2}$$

est bien défini et borné sur \mathfrak{H} , par l'hypothèse (5.20). L'opérateur $A^{-1/2}$ est borné de $Q(A)'$ dans \mathfrak{H} , puisque $Q(A) = D(\sqrt{A})$. Après polarisation, l'hypothèse (5.21) s'écrit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} b(v'_n, v_n) = 0$$

pour toutes suites $v_n, v'_n \rightharpoonup 0$ dans $Q(A)$, où $b(\cdot, \cdot)$ désigne par abus de notation la forme polaire associée à b . Ces suites peuvent justement s'écrire $v_n = A^{-1/2}w_n$ et $v'_n = A^{-1/2}w'_n$ où $w_n, w'_n \rightharpoonup 0$ dans \mathfrak{H} . Ainsi, l'hypothèse (5.21) signifie que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle w'_n, Kw_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle w'_n, A^{-1/2}BA^{-1/2}w_n \rangle = 0$$

pour toutes suites $w_n, w'_n \rightarrow 0$ dans \mathfrak{H} . Comme K est borné nous pouvons prendre $w'_n = Kw_n \rightarrow 0$, ce qui implique que $\|Kw_n\| \rightarrow 0$ pour toute suite $w_n \rightarrow 0$, donc que K est compact. L'hypothèse (5.21) est donc une reformulation du fait que

$$\boxed{K = A^{-1/2}BA^{-1/2} \text{ est compact.}}$$

Par ailleurs, nous avons pour κ, C assez grands

$$\begin{aligned} \frac{1}{C} \left\| (A + \kappa)^{1/2}v \right\|^2 &\leq q_A(v) + b(v) + \kappa\|v\|^2 = \left\| (A' + \kappa)^{1/2}v \right\|^2 \\ &\leq C \left\| (A + \kappa)^{1/2}v \right\|^2, \end{aligned}$$

pour tout $v \in Q(A) = Q(A')$, d'après l'hypothèse (5.20). Écrit différemment, cela signifie que $(A + \kappa)^{1/2}(A' + \kappa)^{-1/2}$ et $(A' + \kappa)^{1/2}(A + \kappa)^{-1/2}$ sont des opérateurs bornés. En conclusion, l'opérateur

$$\begin{aligned} (A' + \kappa)^{-1} - (A + \kappa)^{-1} &= (A + \kappa)^{-1}B(A' + \kappa)^{-1} \\ &= \underbrace{\frac{\sqrt{A}}{A + \kappa}}_{\in \mathcal{B}(\mathfrak{H})} \underbrace{A^{-1/2}BA^{-1/2}}_{=K} \underbrace{\frac{\sqrt{A}}{\sqrt{A + \kappa}}}_{\in \mathcal{B}(\mathfrak{H})} \times \\ &\quad \times \underbrace{(A + \kappa)^{1/2}(A' + \kappa)^{-1/2}}_{\in \mathcal{B}(\mathfrak{H})} \underbrace{(A' + \kappa)^{-1/2}}_{\in \mathcal{B}(\mathfrak{H})} \end{aligned}$$

est compact, ce qui termine la preuve, par le théorème 5.33. \square

5.3.2 Spectre essentiel des opérateurs de Schrödinger

Nous avons déjà prouvé au lemme 1.14 que tout potentiel $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ satisfaisant l'hypothèse (3.15) et tel que $V \rightarrow 0$ à l'infini, fournissait une énergie

$$u \in H^1(\mathbb{R}^d) \mapsto \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|u(x)|^2 dx$$

faiblement continue pour la norme $H^1(\mathbb{R}^d)$. Par le théorème 5.34, ceci implique immédiatement le résultat suivant.

Corollaire 5.35 (Spectre essentiel des opérateurs de Schrödinger). *Soit $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ satisfaisant l'hypothèse (3.15) et tel que $V \rightarrow 0$ à l'infini. Soit $-\Delta + V$ la réalisation de Friedrichs obtenue au corollaire 3.24. Alors*

$$\boxed{\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = [0, +\infty[.]}$$

Une autre façon de montrer le résultat est d'argumenter comme dans la preuve du théorème 5.34. On commence par utiliser la formule de la résolvante

$$(-\Delta + V + C)^{-1} = (-\Delta + C)^{-1} - (-\Delta + C)^{-1}V(-\Delta + V + C)^{-1}$$

où la constante C est choisie assez grande pour que $-\Delta + V + C$ soit coercif. L'équivalence des formes quadratiques implique que

$$B = (-\Delta + C)^{1/2}(-\Delta + V + C)^{-1/2}$$

est un opérateur borné. Comme $(-\Delta + V + C)^{-1/2}$ est aussi borné par le calcul fonctionnel, on voit que le corollaire 5.35 suit alors de la compacité de l'opérateur

$$K = (-\Delta + C)^{-1}V(-\Delta + C)^{-1/2}$$

et du théorème 5.33. Pour montrer que K est compact, on peut alors utiliser le théorème 5.17.

Exemple 5.36. *Pour l'atome d'hydrogène, nous avons*

$$\sigma_{\text{ess}}(-\Delta - 1/|x|) = [0, +\infty[$$

dans $L^2(\mathbb{R}^3)$.

5.4 Valeurs propres et formule de Courant-Fischer

Dans cette section, nous discutons de la présence ou de l'absence de valeurs propres en dessous du spectre essentiel.

5.4.1 Formule de Courant-Fischer

Nous commençons par la formule de Courant-Fischer [Cou20, Fis05], qui généralise une formule similaire pour les matrices hermitiennes.

Théorème 5.37 (Courant-Fischer). *Soit A un opérateur auto-adjoint borné inférieurement sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$ et*

$$\Sigma(A) := \min \sigma_{\text{ess}}(A) \in \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$$

le bas de son spectre essentiel. Alors

$$\mu_k(A) := \inf_{\substack{V \subset D(A) \\ \dim(V)=k}} \max_{\substack{v \in V \\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} \langle v, Av \rangle = \inf_{\substack{V \subset Q(A) \\ \dim(V)=k}} \max_{\substack{v \in V \\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} q_A(v) \quad (5.22)$$

est égal à

- la k ème valeur propre de A comptée avec multiplicité si $\mathbf{1}_{]-\infty, \Sigma(A)]}(A)$ est de rang au moins égal à k ;

- le bas du spectre essentiel $\Sigma(A)$ si A possède moins de k valeurs propres sous $\Sigma(A)$.

Si $\mu_k(A) < \Sigma(A)$, l'infimum de (5.22) est exactement atteint pour les espaces V qui sont engendrés par k vecteurs propres de A , dont les valeurs propres associées sont toutes inférieures ou égales à $\mu_k(A)$.

Une autre formule pour $\mu_k(A)$ est donnée par

$$\mu_k(A) = \sup_{\substack{W \subset D(A) \\ \dim(W^\perp) = k}} \inf_{\substack{v \in W \\ \|v\|_S = 1}} \langle v, Av \rangle = \sup_{\substack{W \subset Q(A) \\ \dim(W^\perp) = k}} \inf_{\substack{v \in W \\ \|v\|_S = 1}} q_A(v). \quad (5.23)$$

La formule de Courant-Fischer est souvent appelée *Rayleigh-Ritz* [Str71, Rit09] en physique et *Hylleraas-Undheim-McDonald (HUM)* [HU30, Mac33] en chimie quantique, du nom de ceux qui l'ont utilisée les premiers pour calculer une approximation des valeurs propres d'un opérateur auto-adjoint. Divers autres auteurs ont en fait utilisé des formules similaires auparavant, comme Weyl [Wey12] et même Poincaré [Poi90] à la fin du XIXème siècle. La formule implique que

$$\mu_k(A) \leq \inf_{\substack{V \subset \mathcal{D} \\ \dim(V) = k}} \max_{\substack{v \in V \\ \|v\|_S = 1}} q_A(v)$$

pour tout espace $\mathcal{D} \subset Q(A)$ de dimension $d \geq k$. En prenant une base (e_1, \dots, e_d) de \mathcal{D} , on se ramène à chercher la k ème valeur propre de la matrice $d \times d$

$$(M_{\mathcal{D}})_{ij} := \varphi_A(e_i, e_j)$$

et l'inégalité assure que cette dernière sera toujours une borne supérieure pour la véritable valeur propre de A . Voir par exemple [Lew17] pour une discussion plus détaillée de la convergence de ces méthodes numériques.

La preuve du théorème 5.37 repose essentiellement sur la propriété fondamentale que tout espace de dimension k doit intersecter l'orthogonal d'un espace de dimension $< k$.

Démonstration. L'égalité des deux formules à droite de (5.22) se montre en utilisant la densité de $D(A)$ dans $Q(A)$ pour la norme associée. Les nombres $\mu_k(A)$ ainsi définis forment une suite croissante :

$$\mu_1(A) \leq \mu_2(A) \leq \dots$$

Notons $\lambda_k(A)$ la k ème valeur propre de A , comptée avec multiplicité, en supposant qu'elle existe. Soit alors V le sous-espace engendré par k vecteurs propres v_j correspondant aux valeurs propres $\lambda_j(A)$ avec $j \leq k$. Pour tout v dans V , nous avons

$$\langle v, Av \rangle = \sum_{j=1}^k \lambda_j(A) |\langle v, v_j \rangle|^2 \leq \lambda_k(A) \sum_{j=1}^k |\langle v, v_j \rangle|^2 = \lambda_k(A) \|v\|^2,$$

de sorte que $\mu_k(A) \leq \lambda_k(A)$. Si A possède moins de k valeurs propres inférieures à $\Sigma(A)$, nous pouvons utiliser que $\mathbb{1}_{]-\infty, \Sigma(A)+\varepsilon]}(A)$ est de rang infini pour tout $\varepsilon > 0$ (comme vu dans la preuve du théorème 5.7). En prenant V n'importe quel sous-espace de dimension k dans l'image du projecteur spectral $\mathbb{1}_{]-\infty, \Sigma(A)+\varepsilon]}(A)$, nous avons par le théorème spectral

$$\langle v, Av \rangle \leq (\Sigma(A) + \varepsilon) \|v\|^2$$

pour tout $v \in V$. En prenant $\varepsilon \rightarrow 0$ nous avons donc montré que $\mu_k(A) \leq \Sigma(A)$ pour tout k .

Il reste à prouver l'inégalité inverse, ce que nous faisons par récurrence sur $k \geq 1$. Pour $k = 1$,

$$\mu_1(A) = \inf_{\substack{v \in V \\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} \langle v, Av \rangle = \min \sigma(A),$$

qui suit du théorème spectral. Le bas du spectre est soit égal à la première valeur propre quand elle existe (avec égalité si et seulement si v est un vecteur propre associé), soit égal au bas du spectre essentiel. Supposons ensuite que l'assertion sur $\mu_k(A)$ a été démontrée et prouvons-la pour $\mu_{k+1}(A)$. Si $\mu_k(A) = \Sigma(A)$, il n'y a rien à démontrer car la suite $\mu_j(A)$ est croissante et inférieure à $\Sigma(A)$, donc $\mu_{k+1}(A) = \Sigma(A)$ également. Ainsi, nous pouvons supposer que $\mu_k(A) = \lambda_k(A) < \Sigma(A)$, ce qui signifie que A a au moins k valeurs propres (comptées avec multiplicité) strictement inférieures à $\Sigma(A)$. Par ailleurs, si $\lambda_{k+1}(A) = \lambda_k(A)$ (ce qui est possible en cas de dégénérescence) alors bien sûr $\mu_{k+1}(A) \geq \mu_k(A) = \lambda_k(A) = \lambda_{k+1}(A)$. Il nous reste donc à traiter la situation où $\lambda_k(A) < \Sigma(A)$ et $\mathbb{1}_{]-\infty, \lambda_k(A)]}(A)$ est de rang exactement k . Soit V_k l'espace engendré par les k premiers vecteurs propres. Si $V \subset D(A)$ est un sous-espace quelconque de dimension $k+1$, alors il doit intersecter $(V_k)^\perp$. Or pour tout $v \in (V_k)^\perp \cap Q(A) = \mathbb{1}_{]\lambda_k(A), +\infty[}(A)\mathfrak{H} \cap Q(A)$ tel que $\|v\| = 1$, nous avons par le calcul fonctionnel

$$q_A(v) \geq \min \sigma(A \mathbb{1}_{]\lambda_k(A), +\infty[}(A)|_{V_k^\perp}).$$

Par le même argument que pour $\lambda_1(A)$, le minimum à droite vaut $\lambda_{k+1}(A)$ (la première valeur propre de $A \mathbb{1}_{]\lambda_k(A), +\infty[}(A)$ sur $(V_k)^\perp$ si elle existe) ou $\Sigma(A)$ (si A n'a que k valeurs propres sous $\Sigma(A)$). Ainsi, nous avons montré la formule (5.22).

Maintenant, si de plus $\lambda_k(A) = \mu_k(A) < \Sigma(A)$, tout sous-espace engendré par k vecteurs propres de valeurs propres $\leq \lambda_k(A)$ réalise l'infimum à droite de (5.22). Soit alors j tel que $\lambda_k(A) = \lambda_{k+j}(A) < \mu_{k+j+1}(A)$ (qui dépend de la multiplicité, finie, de la valeur propre $\lambda_k(A)$). Un sous-espace $V \subset Q(A)$ de dimension k qui intersecte l'image du projecteur spectral $\mathbb{1}_{]\lambda_k(A), +\infty[}(A) = \mathbb{1}_{[\mu_{k+j+1}(A), +\infty[}(A)$ vérifie pour v dans cet espace

$$q_A(v) = q_A \mathbb{1}_{[\mu_{k+j+1}(A), +\infty[}(A)(v) \geq \mu_{k+j+1}(A) \|v\|^2$$

de sorte que

$$\max_{\substack{v \in V \\ \|v\|_{\mathfrak{H}}=1}} \langle v, Av \rangle \geq \mu_{k+j+1}(A) > \lambda_k(A).$$

Ainsi, on ne peut avoir égalité que si V est inclus dans l'image du projecteur spectral $\mathbb{1}_{]-\infty, \lambda_k(A)]}(A)$.

La preuve pour (5.23) est similaire et laissée en exercice. \square

Une méthode pratique pour montrer que A possède au moins k valeurs propres sous son spectre essentiel suit immédiatement de la formule de Courant-Fischer.

Corollaire 5.38 (Critère d'existence de k valeurs propres sous $\Sigma(A)$). *Soit A un opérateur auto-adjoint borné inférieurement sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$ et*

$$\Sigma(A) := \min \sigma_{\text{ess}}(A) \in \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$$

le bas de son spectre essentiel. S'il existe un sous-espace $V \subset Q(A)$ de dimension $\dim(V) = k$ tel que

$$\max_{\substack{v \in V \\ \|v\|=1}} q_A(v) < \Sigma(A)$$

alors A possède au moins k valeurs propres (comptées avec multiplicité) strictement inférieures à $\Sigma(A)$.

La formule de Courant-Fischer permet également de comparer les valeurs propres d'opérateurs en comparant leurs formes quadratiques.

Définition 5.39 (Inégalité entre opérateurs). *Soient A et B deux opérateurs auto-adjoints, bornés inférieurement sur leurs domaines respectifs $D(A)$ et $D(B)$. On dit que*

$$A \leq B$$

lorsque $Q(B) \subset Q(A)$ et $q_A(v) \leq q_B(v)$ pour tout $v \in Q(B)$.

Il est souvent utile en pratique que seuls les domaines des formes quadratiques entrent en jeu, puisque nous rappelons que $D(A)$ et $D(B)$ peuvent être très différents. Le résultat suivant est une conséquence immédiate de la formule de Courant-Fischer.

Corollaire 5.40 (Valeurs propres d'opérateurs ordonnés). *Soient A et B deux opérateurs auto-adjoints, bornés inférieurement sur leurs domaines respectifs $D(A)$ et $D(B)$, tels que $A \leq B$. Alors*

$$\mu_k(A) \leq \mu_k(B) \quad \text{pour tout } k \geq 1, \text{ et } \Sigma(A) \leq \Sigma(B),$$

pour le bas de leur spectre essentiel.

Exemple 5.41 (Valeurs propres de Dirichlet, Neumann et Robin). *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné dont la frontière est Lipschitzienne. Soient $(-\Delta)_{\text{Rob},\theta}$ le Laplacien avec conditions au bord de Robin. Alors les valeurs propres associées, notées $\lambda_k(\theta)$ sont toutes des fonctions décroissantes de $\theta \in]0, 1[$. Ceci suit de la formule de Courant-Fischer, puisque la forme quadratique associée*

$$q_{(-\Delta)_{\text{Rob},\theta}}(u) = \int_{\Omega} |\nabla u(x)|^2 dx + \frac{1}{\tan(\pi\theta)} \int_{\partial\Omega} |u(x)|^2 dx, \\ \text{sur } Q((-\Delta)_{\text{Rob},\theta}) = H^1(\Omega). \quad (5.24)$$

(relire la section 3.3.4) est une fonction décroissante de θ . Par ailleurs il est possible de montrer la convergence de $\lambda_k(\theta)$ vers la k ème valeur propre du Laplacien de Dirichlet quand $\theta \rightarrow 0^+$.

Exercice 5.42 (Régularité des valeurs propres de Robin). *En utilisant la formule de Courant-Fischer, montrer que la fonction $\theta \in [0, 1[\mapsto \lambda_k(\theta)$ est Lipschitz pour tout $k \geq 1$.*

Exercice 5.43 (Principe de Courant). *On se place sur $L^2(\mathbb{R})$, avec un potentiel $V \in C_0^0(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ pour simplifier. En utilisant la formule de Courant-Fischer, montrer que toute fonction propre associée à une valeur propre $\lambda_j < 0$ de $-d^2/dx^2 + V(x)$ s'annule au plus $k - 1$ fois, où $k \geq j$ est l'entier tel que $\lambda_j = \lambda_k < \lambda_{k+1}$. Montrer aussi avec le théorème de Cauchy-Lipschitz que la fonction propre change de signe à chacun de ses points d'annulation.*

5.4.2 Principe variationnel pour la somme des valeurs propres

Pour les particules fermioniques (exercice 6.20 plus bas) nous verrons qu'il est naturel d'étudier la somme des N premières valeurs propres d'un opérateur. Nous fournissons donc ici une formule pour $\sum_{j=1}^N \lambda_j(A)$, qui est un peu moins classique que la formule de Courant-Fischer.

Soit A un opérateur auto-adjoint qui est minoré sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$. Si $W \subset Q(A)$ est un espace de dimension finie, on appelle Π_W le projecteur orthogonal sur W et on note

$$\boxed{\text{Tr}(\Pi_W A) := \sum_{j=1}^k q_A(w_j)} \quad (5.25)$$

la trace de la restriction de q_A à W , où les w_j forment une base orthonormale quelconque de W . On peut vérifier que cette définition ne dépend pas de la base orthonormée de W que l'on choisit. S'il est possible de définir proprement la trace d'un opérateur compact, nous nous contentons ici de voir la formule (5.25) comme une notation.

Théorème 5.44 (Somme des k premières valeurs propres). *Soit A un opérateur auto-adjoint borné inférieurement sur son domaine $D(A) \subset \mathfrak{H}$ et $\mu_k(A)$ les niveaux de Courant-Fischer du théorème 5.37. Alors on a*

$$\sum_{j=1}^k \mu_j(A) = \inf_{\substack{W \subset D(A) \\ \dim(W)=k}} \text{Tr}(\Pi_W A) = \inf_{\substack{W \subset Q(A) \\ \dim(W)=k}} \text{Tr}(\Pi_W A). \quad (5.26)$$

Si $\mu_k(A) < \Sigma(A)$, l'infimum est exactement atteint lorsque W est un espace engendré par k premiers vecteurs propres de A .

Le théorème est généralement attribué à Fan [Fan49], même si on peut supposer qu'il était connu avant à cause du lien avec l'énergie fondamentale des systèmes de k fermions sans interaction.

Démonstration. La borne supérieure se démontre comme au théorème 5.37 et nous discutons ici seulement de la borne inférieure.

Soit $\ell \leq k$ le plus grand entier tel que $\mu_\ell(A)$ soit une valeur propre de A et posons $\mu = \mu_{\ell+1}(A)$, qui est soit égal à la valeur propre suivante si A possède au moins $k+1$ valeurs propres sous son spectre essentiel, soit égal au bas du spectre essentiel $\Sigma(A)$ sinon. Soit (w_1, \dots, w_k) un système orthonormé de vecteurs de $D(A)$ formant un espace W de dimension k , et v_1, \dots, v_ℓ des vecteurs propres de A associés aux ℓ premières valeurs propres. Alors on peut écrire

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^k \langle w_j, Aw_j \rangle &= \sum_{j=1}^k \sum_{m=1}^{\ell} \mu_m(A) |\langle w_j, v_m \rangle|^2 + \sum_{j=1}^k \langle w_j, A \mathbb{1}_{] \mu, +\infty[}(A) w_j \rangle \\ &\geq \sum_{j=1}^k \sum_{m=1}^{\ell} \mu_m(A) |\langle w_j, v_m \rangle|^2 + \mu \sum_{j=1}^k \|\mathbb{1}_{] \mu, +\infty[}(A) w_j\|^2. \end{aligned} \quad (5.27)$$

En utilisant que

$$\|\mathbb{1}_{] \mu, +\infty[}(A) w_j\|^2 = 1 - \|\mathbb{1}_{] -\infty, \mu[}(A) w_j\|^2 = 1 - \sum_{m=1}^{\ell} |\langle w_j, v_m \rangle|^2$$

nous pouvons continuer l'estimée précédente de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^k \langle w_j, Aw_j \rangle \\
& \geq \sum_{j=1}^k \sum_{m=1}^{\ell} \mu_m(A) |\langle w_j, v_m \rangle|^2 + \mu \sum_{j=1}^k \left(1 - \sum_{m=1}^{\ell} |\langle w_j, v_m \rangle|^2 \right) \\
& = \sum_{j=1}^k \sum_{m=1}^{\ell} (\mu_m(A) - \mu) |\langle w_j, v_m \rangle|^2 + \mu k \\
& = \sum_{m=1}^{\ell} (\mu - \mu_m(A)) \left(1 - \sum_{j=1}^k |\langle w_j, v_m \rangle|^2 \right) + \underbrace{\sum_{m=1}^{\ell} \mu_m(A) + \mu(k - \ell)}_{= \sum_{m=1}^k \mu_m(A)}.
\end{aligned}$$

Notre choix de μ implique que $\mu - \mu_m(A) \geq 0$ pour tout $m = 1, \dots, \ell$. On a même $\mu - \lambda_m(A) > 0$ lorsque $\mu_m(A) < \mu_{k+1}(A)$. Par ailleurs,

$$\sum_{j=1}^k |\langle w_j, v_m \rangle|^2 = \|\Pi_W v_m\|^2 \leq \|v_m\|^2 = 1$$

où on rappelle que Π_W est le projecteur orthogonal sur $W = \text{vect}(w_1, \dots, w_k)$. Nous concluons que

$$\sum_{j=1}^k \langle w_j, Aw_j \rangle \geq \sum_{m=1}^k \mu_j(A),$$

comme il fallait démontrer.

Si $\mu_k(A) < \mu_{k+1}(A)$ on doit avoir $\|\Pi_W v_m\| = 1$ pour tout $m \leq k$, ce qui signifie que $\Pi_W v_m = v_m$, donc que $\text{vect}(v_1, \dots, v_k) \subset \text{vect}(w_1, \dots, w_k)$, d'où l'égalité car les deux espaces ont même dimension. Si on a seulement $\mu_k(A) = \mu_{k+1}(A) < \Sigma(A)$, on conclut également que $v_m \in \text{vect}(w_1, \dots, w_k)$ pour $\mu_m(A) < \mu_k(A)$, mais il faut un argument différent pour le niveau $\mu_k(A)$. En fait, quitte à changer de base, on peut supposer que $w_1 = v_1, \dots, w_{k'} = v_{k'}$ ou k' est le plus grand entier tel que $\mu_{k'}(A) < \mu_k(A)$. Il faut alors montrer que $w_{k'+1}, \dots, w_k \in \ker(A - \mu_k(A))$. Ceci suit du cas d'égalité dans (5.27), c'est-à-dire du fait que

$$\langle w_j, A \mathbb{1}_{] \mu, +\infty[}(A) w_j \rangle = \mu \langle w_j, \mathbb{1}_{] \mu, +\infty[}(A) w_j \rangle$$

si et seulement si les w_j sont tous dans l'image de $\mathbb{1}_{] -\infty, \mu[}(A)$. Pour $j \geq k' + 1$ on sait déjà que $\mathbb{1}_{] -\infty, \mu[}(A) w_j = 0$ et ceci signifie donc exactement que $w_j \in \ker(A - \mu_k(A))$, ce qu'il restait à démontrer. \square

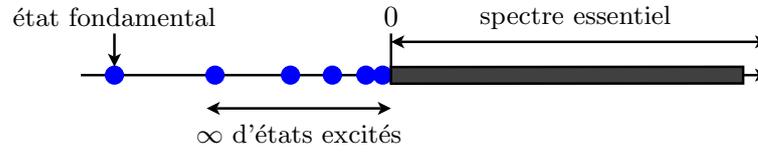


FIGURE 5.1 – Forme du spectre de la réalisation de Friedrichs de l'opérateur de Schrödinger $-\Delta + V$ lorsque V satisfait les hypothèses du théorème 5.45.

5.4.3 Spectre discret des opérateurs de Schrödinger

À l'aide de la formule de Courant-Fischer, nous pouvons maintenant discuter de l'existence ou de l'absence de valeurs propres négatives pour les opérateurs de Schrödinger $-\Delta + V$. Le premier résultat est une adaptation de la proposition 1.18.

Théorème 5.45 (Infinité de valeurs propres si $V \lesssim -|x|^{-\alpha}$ avec $0 < \alpha < 2$).
Soit $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5. \end{cases} \quad (5.28)$$

telle que $V(x) \rightarrow 0$ quand $|x| \rightarrow \infty$ avec l'estimée supérieure

$$V(x) \leq -c|x|^{-\alpha}$$

pour $|x|$ assez grand avec $c > 0$ et $0 < \alpha < 2$. Alors la réalisation de Friedrichs de l'opérateur de Schrödinger $-\Delta + V$ satisfait

$$\mu_k(-\Delta + V) < \Sigma(-\Delta + V) = 0$$

pour tout $k \geq 1$, c'est-à-dire possède une infinité de valeurs propres strictement négatives, qui tendent vers 0.

Ce résultat, qui s'applique par exemple à l'atome d'hydrogène, signifie que le spectre a la forme représentée à la figure (5.1) dès que le potentiel V est négatif à l'infini et ne tend pas trop vite vers 0. Rappelons que les valeurs propres négatives expliquent le spectre de raies que l'on obtient lors d'une expérience de spectroscopie.

Démonstration. La preuve est essentiellement la même que celle de la proposition 1.18. Considérons un sous-espace W quelconque de $C_c^\infty(B_2 \setminus B_1)$ (les fonctions à support dans la couronne située entre les boules de rayon 1 et 2), avec $\dim(W) = k$. Posons ensuite

$$W_n = \{\chi_n(x) = n^{-d/2}\chi(x/n), \quad \chi \in W\} = U_n W \subset C_c^\infty(B_{2n} \setminus B_n)$$

où $U_n v = n^{-d/2} v(\cdot/n)$ est l'unitaire consistant à dilater les fonctions d'un facteur $1/n$. L'espace W_n a donc la même dimension que W . Pour tout $\chi_n = U_n \chi \in W_n$ normalisé dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, nous avons pour n assez grand

$$\begin{aligned} q_{-\Delta+V}(\chi_n) &= \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \chi(x)|^2 dx + \int_{B_2 \setminus B_1} V(nx) |\chi(x)|^2 dx \\ &\leq \frac{1}{n^2} \int_{B_2 \setminus B_1} |\nabla \chi(x)|^2 dx - \frac{c}{n^\alpha} \int_{B_2 \setminus B_1} \frac{|\chi(x)|^2}{|x|^\alpha} dx \\ &\leq \frac{1}{n^2} \max_{\substack{\chi \in W \\ \int_{\mathbb{R}^d} |\chi|^2 = 1}} \int_{B_2 \setminus B_1} |\nabla \chi(x)|^2 dx - \frac{c}{n^\alpha} \min_{\substack{\chi \in W \\ \int_{\mathbb{R}^d} |\chi|^2 = 1}} \int_{B_2 \setminus B_1} \frac{|\chi(x)|^2}{|x|^\alpha} dx. \end{aligned}$$

Comme W est de dimension finie, le minimum

$$\min_{\substack{\chi \in W \\ \int_{\mathbb{R}^d} |\chi|^2 = 1}} \int_{B_2 \setminus B_1} \frac{|\chi(x)|^2}{|x|^\alpha} dx$$

est atteint, donc strictement positif. La formule (5.22) de Courant-Fischer implique alors

$$\mu_k(-\Delta + V) \leq \max_{\substack{\chi \in W \\ \int_{\mathbb{R}^d} |\chi|^2 = 1}} q_{-\Delta+V}(\chi_n)$$

qui est strictement négatif pour n assez grand, car le terme $n^{-\alpha}$ est dominant. Ainsi, $\mu_k(-\Delta + V) < 0 = \Sigma(-\Delta + V)$ pour tout $k \geq 1$ et $-\Delta + V$ possède une infinité de valeurs propres négatives, qui ne peuvent s'accumuler que en 0 car $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = [0, +\infty[$ par le corollaire 5.35. \square

La même preuve montre que le résultat reste valable pour $\alpha = 2$, si les constantes peuvent être comparées de façon appropriée, ce qui peut se faire en dimension $d \geq 3$ par l'inégalité de Hardy (1.52).

Nous allons maintenant voir que la puissance $\alpha = 2$ est critique, au sens où tout potentiel qui décroît comme $|x|^{-\alpha}$ à l'infini avec $\alpha > 2$ ne peut générer qu'un nombre fini de valeurs propres. Plus précisément, nous avons déjà vu à la proposition 1.19 que si V est petit dans $L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$, alors il n'y a aucune valeur propre. Le résultat suivant traite le cas d'un potentiel de taille quelconque.

Théorème 5.46 (Inégalité CLR si $V \in L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$). *Si $V \in L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$ en dimension $d \geq 3$, alors la réalisation de Friedrichs de l'opérateur de Schrödinger $-\Delta + V$ satisfait*

$$\mu_k(-\Delta + V) = \Sigma(-\Delta + V) = 0$$

pour k assez grand. Plus précisément, $-\Delta + V$ n'a qu'un nombre fini de valeurs propres négatives ou nulles, c'est-à-dire $\mathbb{1}_{]-\infty, 0]}(-\Delta + V)$ est de rang

fini et il existe une constante universelle $C_{\text{CLR}}(d)$ ne dépendant que de la dimension d telle que

$$\boxed{\text{rang}(\mathbf{1}_{]-\infty, 0]}(-\Delta + V)) \leq C_{\text{CLR}}(d) \int_{\mathbb{R}^d} V(x)_-^{\frac{d}{2}} dx} \quad (5.29)$$

où $V(x)_- = \max(0, -V(x)) \geq 0$ est la partie négative de la fonction V .

L'inégalité (5.29) est due à Cwikel [Cwi77], Lieb [Lie80] et Rozenbljum [Roz72]. Une inégalité comme (5.29) ne peut être valable en dimension $d = 1, 2$, même avec d'autres normes de V à droite. En effet il est possible de montrer que si $V < 0$ partout, alors $-\Delta + \lambda V$ possède une valeur propre négative pour tout $\lambda > 0$ [RS78, Thm. XIII.11], ce qui contredit toute inégalité du type (5.29) que l'on peut imaginer. Avec des hypothèses supplémentaires sur le potentiel V , il est cependant possible de montrer que $-\Delta + V$ admet un nombre fini de valeurs propres en dimension $d \in \{1, 2\}$. Par exemple, on peut prendre $V \in L_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ (borné à support compact), voir l'exercice 5.54.

La preuve du théorème 5.46 dépasse le cadre de ce cours. Pour illustrer certains outils d'analyse fonctionnelle, nous allons juste montrer que $-\Delta + V$ n'a qu'un nombre fini de valeurs propres en dimension $d \geq 5$ lorsque $V \in L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$, mais par un raisonnement par l'absurde basé sur la convergence faible, qui ne fournit aucune estimée explicite du nombre de valeurs propres. Nous nous plaçons en dimension $d \geq 5$, car l'hypothèse que $V \in L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$ implique que $D(-\Delta + V) = H^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui simplifie l'argument. Nous utilisons l'inégalité de Sobolev dans les espaces $L^p(\mathbb{R}^d)$, qui n'est pas contenue dans le théorème A.10 et que nous admettrons ici [Bre94]. Pour une estimée moins bonne que (5.29) mais valable pour tout $d \geq 3$, voir l'exercice 5.57 plus bas.

Preuve de la finitude du spectre négatif en dimension $d \geq 5$. Par l'absurde, supposons que $-\Delta + V$ possède une infinité de vecteurs propres $v_n \in H^2(\mathbb{R}^d)$ formant un système orthonormé dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, de valeurs propres $-\lambda_n \leq 0$. Alors nous avons $v_n \rightharpoonup 0$ et

$$-\Delta v_n + V v_n = -\lambda_n v_n,$$

que nous réécrivons sous la forme

$$(-\Delta + \lambda_n)v_n = -V v_n.$$

Comme V est infinitésimalement $(-\Delta)$ -borné (théorème 3.5), nous avons par exemple

$$\|V v_n\| \leq \frac{1}{2} \|\Delta v_n\| + C \|v_n\|,$$

qui implique que v_n est bornée dans $H^2(\mathbb{R}^d)$, donc que $v_n \rightarrow 0$ dans $L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^{\frac{2d}{d-4}}(\mathbb{R}^d)$, par l'injection de Sobolev (théorème A.10). De plus, nous avons $v_n \rightarrow 0$ fortement dans $L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$. Nous voulons en déduire que $v_n \rightarrow 0$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui sera une contradiction avec le fait que $\|v_n\| = 1$.

Supposons d'abord $\lambda_n > 0$ pour simplifier. Alors $-\lambda_n \notin \sigma(-\Delta)$ et nous en déduisons

$$v_n = -(-\Delta + \lambda_n)^{-1} V v_n. \quad (5.30)$$

Nous allons ensuite utiliser le fait que l'opérateur $(-\Delta)^{-1} V$ est compact, ce qui donnera $v_n \rightarrow 0$, la contradiction recherchée. La compacité ne suit pas du théorème 5.17 car $p \mapsto (|p|^2 + \lambda_n)^{-1}$ n'est pas dans $L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$. Nous devons donc argumenter comme à la remarque 5.19. Nous utiliserons en fait l'information supplémentaire que v_n est bornée dans $H^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui nous ramène à plutôt étudier $(-\Delta)^{-1} V (1 - \Delta)^{-1}$.

Mais avant, cherchons une estimée indépendante de λ_n . L'équation (5.30) peut se réécrire sous la forme

$$v_n(x) = G_{\lambda_n} * (V v_n)(x)$$

où G_{λ_n} est la transformée de Fourier inverse de $k \mapsto (2\pi)^{-d/2} (\lambda_n + |k|^2)^{-1}$, qui peut s'exprimer par la même formule que (A.24) par

$$G_{\lambda_n}(x) = 2^{-d/2} \frac{1}{|x|^{d-2}} \int_0^\infty e^{-t\lambda_n|x|^2 - \frac{1}{4t}} \frac{dt}{t^{\frac{d}{2}}} \leq \frac{C_d}{|x|^{d-2}} = G_0(x), \quad (5.31)$$

où $C_d = 2^{-d/2} \int_0^\infty e^{-\frac{1}{4t}} t^{-d/2} dt$ est la constante obtenue pour $\lambda_n = 0$. Nous voyons donc que

$$|v_n| \leq G_0 * |V v_n| = (-\Delta)^{-1} |V| |v_n|. \quad (5.32)$$

Si $\lambda_n = 0$, nous pouvons écrire

$$v_n = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (-\Delta + \varepsilon)^{-1} (\varepsilon v_n - V v_n)$$

ce qui fournit la même inégalité (5.32). Dans tous les cas il suffit de montrer que le terme à droite de (5.32) tend vers 0 dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ pour en déduire la même convergence pour v_n et conclure la preuve du théorème.

L'inégalité de Hardy-Littlewood-Sobolev (5.17) mentionnée plus haut à la remarque 5.19 implique que

$$\|(-\Delta)^{-1} |V| |v_n|\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = C \left\| |x|^{2-d} * |V| |v_n| \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq C \|V v_n\|_{L^{\frac{2d}{d+4}}(\mathbb{R}^d)} \quad (5.33)$$

et il suffit donc de montrer que le terme de droite tend vers 0. On peut aussi obtenir (5.33) en utilisant l'injection de Sobolev critique $W^{2, \frac{2d}{d+4}}(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$ qui s'énonce sous la forme

$$\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq C \|\Delta f\|_{L^{\frac{2d}{d+4}}(\mathbb{R}^d)} \quad (5.34)$$

en dimension $d \geq 4$ et est équivalent à (5.17). En conclusion, il faut montrer que $Vv_n \rightarrow 0$ fortement dans $L^{\frac{2d}{d+4}}(\mathbb{R}^d)$, c'est-à-dire que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} |V(x)|^{\frac{2d}{d+4}} |v_n(x)|^{\frac{2d}{d+4}} dx = 0. \quad (5.35)$$

Ici, $|V|^{\frac{2d}{d+4}}$ appartient à $L^{\frac{d+4}{4}}(\mathbb{R}^d)$ et la suite $|v_n|^{\frac{2d}{d+4}}$ est bornée dans $L^{\frac{d+4}{d}}(\mathbb{R}^d)$, donc admet des sous-suites faiblement convergentes dans cet espace. En général, les suites faiblement convergentes se comportent très mal avec les puissances, mais ici nous pouvons utiliser la convergence forte locale de v_n dans $L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$, qui implique que $|v_n|^{\frac{2d}{d+4}} \rightarrow 0$ fortement dans $L^{\frac{d+4}{d}}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$. La seule limite faible possible des sous-suites vaut 0 et donc

$$|v_n|^{\frac{2d}{d+4}} \rightharpoonup 0 \quad \text{faiblement dans } L^{\frac{d+4}{d}}(\mathbb{R}^d).$$

Ceci démontre bien (5.35) et termine la preuve qu'il y a un nombre fini de valeurs propres négatives ou nulles, en dimension $d \geq 5$. \square

Nous fournissons plus bas à l'exercice 5.57 une preuve plus longue, mais pas beaucoup plus difficile, d'une estimée quantitative sur le nombre de valeurs propres négatives, qui est toutefois un peu moins bonne que (5.29). L'idée est la suivante. On part de l'équation (5.30) (qui était déjà la relation clé de la preuve précédente) qu'on multiplie par la fonction $|V|^{1/2}$. Ceci fait naturellement apparaître l'opérateur auto-adjoint compact positif

$$K_E = |V(x)|^{1/2} (-\Delta + E)^{-1} |V(x)|^{1/2}.$$

En supposant $V \leq 0$ pour simplifier, on montre alors à l'exercice 5.57 que u est une fonction propre de $-\Delta + V$ de valeur propre $\lambda \leq 0$, si et seulement si $|V|^{1/2}u$ est une fonction propre de $K_{-\lambda}$ de valeur propre 1. Comme, de plus, les valeurs propres de K_E sont continues et décroissantes par rapport à E , ceci permet d'estimer le nombre de valeurs propres négatives de $-\Delta + V$ par le nombre de valeurs propres supérieures à 1 de K_0 :

$$\boxed{\text{rang} (\mathbf{1}_{]-\infty, 0]}(-\Delta + V)) \leq \text{rang} (\mathbf{1}_{[1; +\infty[}(K_0))} \quad (5.36)$$

(faire un dessin). Cette technique, due à Birman et Schwinger, permet donc de ramener l'étude du spectre de l'opérateur non borné $-\Delta + V$ à celle de l'opérateur compact $K_0 = |V(x)|^{1/2} (-\Delta)^{-1} |V(x)|^{1/2}$, qui a une forme proche de celle des opérateurs étudiés à la section 5.2.1. La dernière étape consiste à estimer le terme à droite de (5.36). On peut par exemple commencer par la borne

$$\text{rang} (\mathbf{1}_{[1; +\infty[}(K_0)) \leq \sum_j \lambda_j(K_0)^n$$

pour un entier n bien choisi de sorte que la somme à droite converge. Comme expliqué plus bas à l'exercice 5.57, un calcul de la somme permet de montrer l'inégalité

$$\begin{aligned} \text{rang} \left(\mathbb{1}_{]-\infty, 0]}(-\Delta + V) \right) &\leq C \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{|V(x)|^{n/2} |V(y)|^{n/2}}{|x-y|^{2(d-n)}} dx dy \\ &\leq C' \|V\|_{L^{\frac{d}{2}}(\mathbb{R}^d)}^n \end{aligned} \quad (5.37)$$

où n est le plus petit entier *strictement supérieur* à $d/2$. Même quand d est pair, il se trouve que l'intégrale double à droite de (5.37) diverge pour $n = d/2$, ainsi que la constante C' . C'est ce qui empêche de prendre $n = d/2$.

La preuve de Cwikel consiste elle à montrer directement que

$$\forall N \geq 1, \quad \frac{1}{N^{1-2/d}} \sum_{j=1}^N \lambda_j(K_0) \leq C \|V\|_{L^{d/2}(\mathbb{R}^d)},$$

où les valeurs propres $\lambda_j(K_0)$ sont ici ordonnées de façon décroissante. Ceci implique alors le résultat en prenant, $N = \text{rang} \left(\mathbb{1}_{[1; +\infty[}(K_0) \right)$.

L'inégalité (5.29) appartient à toute une classe très importante d'estimées concernant les valeurs propres négatives des opérateurs de Schrödinger, communément appelées *inégalités semi-classiques* ou *inégalités de Lieb-Thirring*, du nom de leurs deux inventeurs [LT75, LT76, LS10] (voir le théorème 5.52 plus loin). Le caractère semi-classique provient du fait que le terme à droite de (5.29) est exact à la limite semi-classique. Plus précisément, nous allons montrer à la section suivante que si on dilate le potentiel $V(x)$ en $V(\varepsilon x)$ avec $\varepsilon \rightarrow 0$, de sorte qu'il devienne essentiellement constant localement, alors

$$\boxed{\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^d \text{rang} \left(\mathbb{1}_{]-\infty, 0]}(-\Delta + V(\varepsilon x)) \right) = \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} V(x)^{\frac{d}{2}} dx.} \quad (5.38)$$

Ainsi, pour un potentiel sous la forme $V(\varepsilon x)$ avec $V \in L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$, le nombre de valeurs propres se comporte comme ε^{-d} à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, en dimension $d \geq 3$. C'est aussi la raison pour laquelle (5.37) est une bien moins bonne estimée, car le terme de droite diverge trop vite quand $n > d/2$.

5.5 Un peu d'analyse semi-classique*

L'objectif de cette section est de déterminer plus précisément le comportement des valeurs propres de l'opérateur $-\Delta + V(\varepsilon x)$ à la limite où $\varepsilon \rightarrow 0$. Après une dilatation de x d'un facteur ε , ceci revient à étudier l'opérateur $-\varepsilon^2 \Delta + V(x)$, où le caractère semi-classique est maintenant plus transparent. Comme nous travaillons dans un système d'unités où $\hbar^2 = 2m$, nous préférons changer l'échelle de variation spatiale ε du potentiel extérieur V ,

plutôt que la constante physique \hbar . Dans la première section nous commençons par le cas où V est constant et où on travaille sur un cube, ce qui sera ensuite utile pour le cas de tout l'espace \mathbb{R}^d avec un potentiel variable.

5.5.1 Valeurs propres du Laplacien dans $\Omega \subset \mathbb{R}^d$

Nous avons vu aux exemples 5.23 et 5.25 que les valeurs propres des Laplacien de Dirichlet et de Neumann sur un cube quelconque $C \subset \mathbb{R}^d$ valaient

$$\sigma((-\Delta)_{\text{Dir}}) = \frac{\pi^2}{|C|^{2/d}} \left\{ \sum_{j=1}^d k_j^2, k_j \geq 1 \right\}$$

et

$$\sigma((-\Delta)_{\text{Neu}}) = \frac{\pi^2}{|C|^{2/d}} \left\{ \sum_{j=1}^d k_j^2, k_j \geq 0 \right\}$$

où $|C|^{1/d}$ est la longueur de l'arête du cube, lorsque $|C|$ désigne le volume de ce dernier. La différence entre les deux spectres devient négligeable lorsqu'on regarde un grand ensemble de valeurs propres, par exemple si on compte le nombre de valeurs propres inférieures à un niveau E et qu'on prend la limite $E \rightarrow +\infty$.

Lemme 5.47 (Asymptotique de Weyl pour un hypercube). *Soit $C \subset \mathbb{R}^d$ un cube de taille arbitraire et*

$$N_{\text{Dir/Neu}}(E, C)$$

le nombre de valeurs propres du Laplacien de Dirichlet/Neumann, inférieures strictement à E , comptées avec multiplicité. Alors il existe une constante universelle $K = K(d)$ (ne dépendant que de la dimension), telle que

$$\left| N_{\text{Dir/Neu}}(E, C) - \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} E^{d/2} |C| \right| \leq K(d) \left(1 + |C|^{\frac{d-1}{d}} E^{\frac{d-1}{2}} \right). \quad (5.39)$$

Démonstration. Après dilatation et translation, il suffit de montrer le résultat pour le cube unité $C =]0, 1[^d$. Le nombre de valeurs propres de Dirichlet strictement inférieures à E est égal au nombre de vecteurs $k = (k_1, \dots, k_d) \in (\mathbb{Z}_+^*)^d$ tels que $|k|^2 = \sum_{j=1}^d k_j^2 < E\pi^{-2}$. Soit $C_k = \prod_{j=1}^d]k_j - 1, k_j[$ le cube dont k est à l'extrémité droite supérieure (en dimension 2). Ces cubes sont tous inclus dans l'intersection de la boule de rayon \sqrt{E}/π avec $\{(x_1, \dots, x_d) : x_i \geq 0\}$ (Figure 5.2). Comme cette région est de volume

$$2^{-d} |B(0, \sqrt{E}/\pi)| = \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} E^{d/2},$$

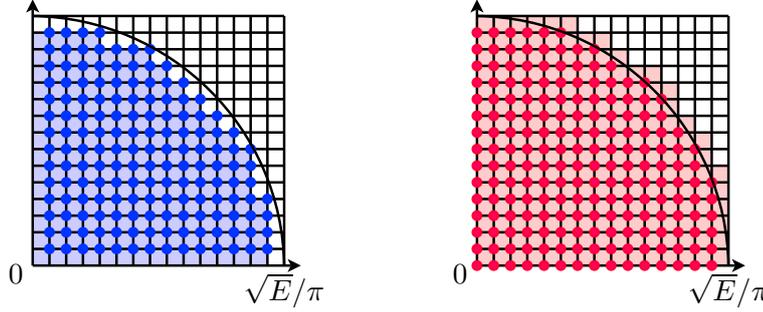


FIGURE 5.2 – Les $k \in (\mathbb{Z}_+)^2$ qui fournissent toutes les valeurs propres $|k|^2$ des Laplacien de Dirichlet (gauche) et Neumann (droite) à l'intérieur du disque de rayon E/π^2 .

nous avons

$$N_{\text{Dir}}(E, C) \leq \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} E^{d/2}.$$

De la même façon, pour le Laplacien de Neumann il est naturel d'introduire les cubes $C'_k = \prod_{j=1}^d [k_j, k_j + 1[$ dont k est à l'autre extrémité, et on trouve par le même argument

$$N_{\text{Neu}}(E, C) \geq \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} E^{d/2}.$$

La différence entre le nombre de valeurs propres des deux opérateurs est égale au nombre de $k \in (\mathbb{Z}_+)^d$ dont au moins une des composantes s'annule, c'est-à-dire

$$\begin{aligned} N_{\text{Neu}}(E, C) - N_{\text{Dir}}(E, C) \\ = \# \left\{ (k_1, \dots, k_d) \in (\mathbb{Z}_+)^d : \prod_{j=1}^d k_j = 0, |k|^2 < \sqrt{E}/\pi^2 \right\}. \end{aligned}$$

D'après l'estimée précédente sur le Laplacien de Dirichlet, le nombre de vecteurs $k = (k_1, \dots, k_d)$ qui ont exactement ℓ composantes non nulles est majoré par $E^{\ell/2}$. Donc

$$N_{\text{Neu}}(E, C) - N_{\text{Dir}}(E, C) \leq K \sum_{\ell=0}^{d-1} E^{\ell/2} \leq K \left(1 + E^{\frac{d-1}{2}}\right),$$

ce qui termine la preuve. \square

Le lemme 5.47 précise que pour tout cube fixé C , le nombre de valeurs propres sous E a un comportement en $E^{d/2}$ à la limite $E \rightarrow \infty$. De façon équivalente, si nous fixons un niveau d'énergie E et faisons grandir le cube,

le nombre de valeurs propres sous E se comporte de façon proportionnelle au volume. Il se trouve que ces comportements sont universels et n'ont rien de spécifique aux cubes. Le résultat suivant, dû à Weyl [Wey12], est un premier pas vers la compréhension du spectre des opérateurs de Schrödinger avec des méthodes semi-classiques. Nous nous restreignons au Laplacien de Dirichlet pour simplifier.

Théorème 5.48 (Asymptotique de Weyl pour un domaine Ω quelconque). *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné dont la frontière est de mesure négligeable, au sens où*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} |\partial\Omega + B(0, \varepsilon)| = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left| \left\{ x \in \mathbb{R}^d : d(x, \partial\Omega) < \varepsilon \right\} \right| = 0. \quad (5.40)$$

Soit

$$N_{\text{Dir}}(E, \Omega)$$

le nombre de valeurs propres du Laplacien de Dirichlet sur Ω , inférieures strictement à E , comptées avec multiplicité. Alors

$$\lim_{E \rightarrow +\infty} \frac{N_{\text{Dir}}(E, \Omega)}{E^{d/2}} = \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} |\Omega|. \quad (5.41)$$

Pour un domaine dont la frontière est régulière (par exemple C^1), le volume de (5.40) sera d'ordre ε , au quel cas la preuve ci-dessous fournit une estimée quantitative (non optimale) pour tout E .

De façon équivalente, nous pouvons dilater le domaine Ω d'un facteur ℓ à E fixé, ce qui donne

$$\lim_{\ell \rightarrow +\infty} \frac{N_{\text{Dir}}(E, \ell\Omega)}{\ell^d} = \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} E^{d/2} |\Omega|. \quad (5.42)$$

Démonstration. La preuve repose fortement sur le principe de Courant-Fischer et les comparaisons de formes quadratiques, comme vu à la section 5.4.1. Elle est issue de [RS78, Sec. XIII.15]. Considérons un pavage du plan par des cubes de côté ε , c'est-à-dire

$$\varepsilon C_k = \prod_{j=1}^d [\varepsilon k_j, \varepsilon(k_j + 1)[, \quad k_j \in \mathbb{Z}.$$

Dans chacun des cubes qui sont strictement à l'intérieur de Ω (Figure 5.3), nous pouvons considérer les vecteurs propres du Laplacien de Dirichlet à l'intérieur de ce petit cube, dont la valeur propre est strictement inférieure à E . Ces vecteurs propres sont dans $H_0^1(\Omega)$. Le spectre du Laplacien de Dirichlet est le même dans chacun de ces cubes, par invariance par translation. Dans l'espace W engendré par tous ces vecteurs, la forme quadratique

est diagonale par blocs, car deux vecteurs dans des cubes différents sont orthogonaux puisqu'à support disjoint. Ainsi, nous avons

$$q_{(-\Delta)}(v) = \int_{\Omega} |\nabla v|^2 < E \int_{\Omega} |v|^2, \quad \forall v \in W.$$

Par la formule de Courant-Fischer (5.22), nous en déduisons que

$$\mu_{\dim(W)}(-\Delta) < E.$$

Le nombre de valeurs propres inférieures à E dans Ω est donc

$$N_{\text{Dir}}(E, \Omega) \geq \dim(W) = N_{\text{Dir}}(E, \varepsilon C_k) \times \#\{k \in \mathbb{Z}^d : \varepsilon C_k \subset \Omega\}.$$

Les cubes qui intersectent Ω mais ne sont pas à l'intérieur sont au plus à distance $\varepsilon\sqrt{d}$ du bord, de sorte que

$$|\Omega| \geq \varepsilon^d \#\{k \in \mathbb{Z}^d : \varepsilon C_k \subset \Omega\} \geq |\Omega| - |\partial\Omega + B(0, \varepsilon\sqrt{d})|.$$

En utilisant (5.39) nous en déduisons que

$$N_{\text{Dir}}(E, \Omega) \geq \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} E^{d/2} \left(|\Omega| - |\partial\Omega + B(0, \varepsilon\sqrt{d})| \right) + O\left(\varepsilon^{-1} E^{\frac{d-1}{2}}\right).$$

Pour un domaine Ω régulier, l'erreur est d'ordre $\varepsilon E^{d/2} + E^{(d-1)/2} \varepsilon^{-1}$ ce qui suggère de prendre $\varepsilon = E^{-1/4}$. Dans le cas général, il n'est pas possible d'exhiber un ε concret, mais nous pouvons toujours faire tendre $\varepsilon \rightarrow 0$ très lentement ou, ce qui revient au même, prendre d'abord $E \rightarrow \infty$ puis ensuite $\varepsilon \rightarrow 0$. Nous trouvons dans tous les cas

$$\liminf_{E \rightarrow \infty} \frac{N_{\text{Dir}}(E, \Omega)}{E^{d/2}} \geq \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} |\Omega|.$$

Pour obtenir l'estimée opposée, nous considérons cette fois l'ensemble de tous les petits cubes εC_k qui intersectent Ω . Dans chacun des εC_k , considérons toutes les fonctions propres du Laplacien de Neumann, dont la valeur propre correspondante est strictement inférieure à E . Ces fonctions sont dans $H^1(\varepsilon C_k)$, donc bien dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ mais pas dans $H^1(\mathbb{R}^d)$. De façon similaire à précédemment, l'espace W' engendré par toutes ces fonctions est de dimension

$$\begin{aligned} \dim(W') &= N_{\text{Neu}}(E, \varepsilon C_k) \times \#\{k \in \mathbb{Z}^d : \varepsilon C_k \cap \Omega \neq \emptyset\} \\ &\leq \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} E^{d/2} \left(|\Omega| + |\partial\Omega + B(0, \varepsilon\sqrt{d})| \right) + O\left(\varepsilon^{-d} E^{\frac{d-1}{2}}\right). \end{aligned}$$

Maintenant, pour tout $v \in H_0^1(\Omega)$, nous avons

$$\int_{\Omega} |\nabla v|^2 = \sum_{\varepsilon C_k \cap \Omega \neq \emptyset} \int_{\varepsilon C_k \cap \Omega} |\nabla v|^2.$$

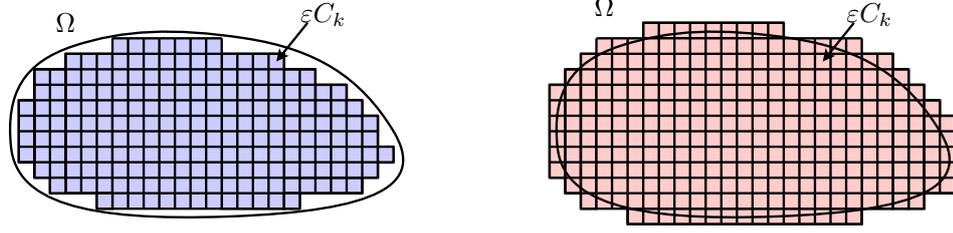


FIGURE 5.3 – Preuve du théorème 5.48 : on utilise les fonctions propres de tous les petits cubes εC_k inclus dans l’ouvert Ω comme fonctions tests pour le Laplacien de Dirichlet sur Ω , ce qui fournit une borne supérieure sur ses valeurs propres (donc une borne inférieure sur $N_{\text{Dir}}(E, \Omega)$). Puis on utilise toutes les fonctions propres des cubes qui intersectent Ω avec la condition de Neumann, ce qui fournit une borne inférieure sur les valeurs propres dans le domaine Ω (donc une borne supérieure sur $N_{\text{Dir}}(E, \Omega)$).

Si v est dans $(W')^\perp \cap H_0^1(\Omega)$, nous avons par le théorème spectral

$$\int_{\varepsilon C_k \cap \Omega} |\nabla v|^2 \geq E \int_{\varepsilon C_k \cap \Omega} |v|^2. \quad (5.43)$$

pour tout k , car $v|_{\varepsilon C_k}$ est orthogonal à tous les vecteurs propres du Laplacien de Neumann de valeur propre $< E$, dans εC_k . Ainsi,

$$\int_{\Omega} |\nabla v|^2 \geq E \int_{\Omega} |v|^2, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \cap (W')^\perp$$

ou encore

$$\inf_{\substack{v \in H_0^1(\Omega) \cap (W')^\perp \\ \|v\|=1}} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 \geq E.$$

Par la seconde formule de Courant-Fischer (5.23), ceci montre que

$$\mu_{\dim(W')}(-\Delta) \geq E,$$

car $(H_0^1(\Omega) \cap (W')^\perp)^\perp = W'$. Ainsi,

$$N_{\text{Dir}}(E, \Omega) \leq \dim(W'),$$

ce qui termine la preuve du théorème. \square

De cette preuve on pourra retenir que les conditions de Dirichlet sont très utiles pour obtenir des bornes supérieures sur les valeurs propres, puisque toute fonction dans $H_0^1(A)$ est dans $H_0^1(B)$ quand $A \subset B$. À l’inverse, les conditions de Neumann servent à obtenir des bornes inférieures sur les valeurs propres. L’utilisation de ces deux opérateurs “en tandem”, s’appelle en anglais la méthode du *Dirichlet-Neumann bracketing*.

Remarque 5.49. *Pour un ouvert régulier, notre preuve fournit l'estimée*

$$N_{\text{Dir}}(E, \Omega) = \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi)^d} E^{d/2} |\Omega| + O\left(E^{\frac{d}{2}-\frac{1}{4}}\right)$$

qui n'est pas optimale. Le terme suivant du développement est d'ordre $|\partial\Omega|E^{\frac{d-1}{2}}$ sous certaines conditions [Ivr16].

Remarque 5.50 (Peut-on entendre la forme d'un tambour?). *Une question naturelle est de se demander si on peut retrouver le domaine Ω (à isométries de \mathbb{R}^d près) à partir de la fonction $E \mapsto N_{\text{Dir}}(E, \Omega)$. Comme $E \mapsto N_{\text{Dir}}(E, \Omega)$ est la fonction de comptage des valeurs propres du Laplacien de Dirichlet, c'est équivalent à se demander si on peut retrouver Ω à partir du spectre de $(-\Delta)_{\text{Dir}}$, une question célèbre posée par Mark Kac en 1966 [Kac66]. La réponse à cette question est en général non, en dimension $d \geq 2$.*

5.5.2 Limite semi-classique pour $-\Delta + V$

Voici maintenant un résultat qui fournit en particulier la limite semi-classique (5.38) énoncée plus haut, en toute dimension.

Théorème 5.51 (Limite semi-classique des valeurs propres négatives). *On suppose que $d \geq 1$. Soit $V \in C_c^0(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ (continue à support compact) et f une fonction positive à support dans l'intervalle $]-\infty, 0]$, qui est continue par morceaux. Alors on a*

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^d \sum_j f\left(\lambda_j(-\Delta + V(\varepsilon x))\right) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon^d}{(2\pi)^d} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} f(|p|^2 + V(\varepsilon x)) dp dx \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} f(|p|^2 + V(x)) dp dx, \end{aligned} \quad (5.44)$$

où les $\lambda_j(-\Delta + V(\varepsilon x))$ sont toutes les valeurs propres négatives ou nulles de l'opérateur $-\Delta + V(\varepsilon x)$ auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$, qui sont répétées en cas de multiplicité.

L'intégrale à droite de (5.44) est finie car V est bornée et f est bornée localement, de sorte que $\lambda_j(-\Delta + V(\varepsilon x)) \geq -\|V_-\|_{L^\infty}$ et

$$\begin{aligned} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} f(|p|^2 + V(x)) dp dx &\leq C \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \mathbf{1}(|p|^2 + V(x) \leq 0) dp dx \\ &= C \int_{\mathbb{R}^d} \left(\int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}(|p|^2 \leq V(x)_-) dp \right) dx \\ &= C \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d} \int_{\mathbb{R}^d} V(x)_-^{\frac{d}{2}} dx \end{aligned}$$

où $C = \sup_{-\|V_-\|_{L^\infty} \leq x \leq 0} |f(x)|$. En particulier, si nous prenons $f(x) = \mathbb{1}_{\mathbb{R}^-}(x)$, nous obtenons exactement la limite (5.38).

La convergence (5.44) exprime le fait que lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, les observables quantiques $f(-\Delta + V(\varepsilon x))$ convergent vers leur équivalent classique $f(|p|^2 + V(\varepsilon x))$ sur l'espace des phases $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, voir la section 1.6.5. En effet, la somme à gauche de (5.44) est (formellement) égale à la trace de l'opérateur $f(-\Delta + V(\varepsilon x))$, de sorte que (5.44) peut se réécrire

$$\boxed{\operatorname{Tr} f(-\Delta + V(\varepsilon x)) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^d} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} f(|p|^2 + V(\varepsilon x)) dx dp}$$

où $-i\nabla$ a été remplacé par la variable classique p et la trace devient une intégrale sur l'espace des phases, multipliée par $(2\pi)^{-d}$.

Selon la dimension d , la convergence (5.44) est vraie pour des classes plus grandes de potentiels. Par exemple, en dimension $d \geq 3$, on peut se contenter de supposer que $V \in L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$. Par ailleurs, l'hypothèse que V est continue est bien trop forte. La preuve ci-dessous fonctionne sous la condition que V puisse être approchée par le dessous et par le dessus par une suite de fonctions étagées, dans $L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$.

Démonstration. Posons $V_\varepsilon(x) = V(\varepsilon x)$. Nous écrivons la preuve d'abord dans le cas où $f(x) = \mathbb{1}(x < 0)$, auquel cas nous devons prouver que le nombre $N(0, V_\varepsilon)$ de valeurs propres négatives de l'opérateur $-\Delta + V_\varepsilon$ se comporte comme

$$\frac{1}{(2\pi\varepsilon)^d} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \mathbb{1}(|p|^2 \leq -V(x)) dp dx = \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi\varepsilon)^d} \int_{\mathbb{R}^d} V(x)_-^{\frac{d}{2}} dx.$$

La démonstration est exactement la même que celle du théorème 5.48 et nous nous contentons d'en donner les idées principales. Considérons un pavage de \mathbb{R}^d avec des cubes $\{\ell C_k\}_{k \in \mathbb{Z}^d}$ de volume ℓ^d , où $1 \ll \ell \ll \varepsilon^{-1}$, par exemple $\ell = \varepsilon^{-1/2}$. Dans chacun de ces cubes, la fonction $x \mapsto V(\varepsilon x)$ varie très peu (si elle est dérivable, sa dérivée est d'ordre ε sur un domaine de taille ℓ avec $\ell\varepsilon \rightarrow 0$). Nous allons donc remplacer $V(\varepsilon x)$ par une fonction constante dans chacun des cubes en prenant soit son maximum sur le cube, soit son minimum.

Considérons d'abord tous les cubes ℓC_k inclus dans le support de V_ε (de façon équivalente, $\varepsilon \ell C_k$ est dans le support de V) et prenons l'espace engendré par les fonctions propres du Laplacien de Dirichlet sur chaque cube ℓC_k , dont les valeurs propres sont strictement inférieures à $-\max_{\ell C_k} V_\varepsilon = -\max_{\varepsilon \ell C_k} V$. Ces fonctions forment un espace sur lequel la forme quadratique associée à $-\Delta + V(\varepsilon x)$ est négative, ce qui prouve que le nombre de

ses valeurs propres négatives est au moins égal à

$$\begin{aligned} \sum_{\varepsilon \ell C_k \subset \text{supp}(V)} N_{\text{Dir}} \left(-\max_{\varepsilon \ell C_k} V, \ell C_k \right) \\ \geq \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{d(2\pi\varepsilon)^d} \sum_{\varepsilon \ell C_k \subset \text{supp}(V)} |\varepsilon \ell C_k| \left(-\max_{\varepsilon \ell C_k} V \right)_+^{\frac{d}{2}} \\ - K \sum_{\varepsilon \ell C_k \subset \text{supp}(V)} (1 + \ell^{d-1} \max_{\varepsilon \ell C_k} |V|^{\frac{d-1}{2}}). \end{aligned}$$

Nous avons utilisé ici l'estimée (5.39) sur $N_{\text{Dir}}(E, C)$. Le premier terme est une somme de Riemann qui converge vers $\int_{\mathbb{R}^d} V_-^{d/2}$ alors que le second est un $O(\varepsilon^{-d}\ell^{-1})$.

Pour avoir une borne dans l'autre sens, on écrit comme dans la preuve du théorème 5.48

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla v|^2 + V|v|^2 &\geq \sum_{\ell C_k \cap \text{supp}(V_\varepsilon) \neq \emptyset} \int_{\ell C_k} |\nabla v|^2 + V_\varepsilon |v|^2 \\ &\geq \sum_{\ell C_k \cap \text{supp}(V_\varepsilon) \neq \emptyset} \int_{\ell C_k} |\nabla v|^2 - \left(\min_{\varepsilon \ell C_k} V \right)_- \int_{\ell C_k} |v|^2. \end{aligned}$$

L'utilisation des fonctions propres avec condition au bord de Neumann sur chacun des cubes ℓC_k , dont les valeurs propres sont inférieures à $(\min_{\varepsilon \ell C_k} V)_-$ et de l'inégalité (5.39) fournit une borne supérieure sur le nombre de valeurs propres négatives, qui permet de conclure la preuve du théorème pour $f(x) = \mathbf{1}(x \leq 0)$.

Si on prend maintenant $f(x) = \mathbf{1}(x < a)$ avec $a \leq 0$, il faut estimer le nombre de valeurs propres inférieures à a de $-\Delta + V_\varepsilon$, qui est bien sûr égal au nombre de valeurs propres négatives de $-\Delta + V_\varepsilon - a$. Le potentiel $V_\varepsilon - a$ ne tend pas vers 0 à l'infini, ce qui ne joue aucun rôle ici (le spectre essentiel commence à $-a \geq 0$). La preuve précédente montre alors que la limite (5.44) est valable pour $f(x) = \mathbf{1}(x < a)$ avec $a \leq 0$.

Par différence, nous obtenons la limite pour $f(x) = \mathbf{1}(a \leq x < b)$ où $b \leq 0$. Comme $V \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$, l'opérateur $-\Delta + V_\varepsilon$ a son spectre inclus dans $[-\|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)}, +\infty[$. Seule la restriction de f à $[-\|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)}; 0]$ importe donc pour la limite (5.44). Or, toute fonction continue par morceaux peut être approchée par le dessous et le dessus par des fonctions étagées, pour lesquelles la limite a été démontrée. Un argument par densité permet de conclure la preuve. \square

5.5.3 Inégalités de Lieb-Thirring

La convergence (5.44) dans le cas où $f(x) = x_-$ concerne la somme des valeurs propres négatives :

$$\begin{aligned} \sum_j |\lambda_j(-\Delta + V(\hbar x))| &\underset{\hbar \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^d} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} (|p|^2 + V(\hbar x))_- dp dx \\ &= \frac{2|\mathbb{S}^{d-1}|}{(2\pi\hbar)^d d(d+2)} \int_{\mathbb{R}^d} V(x)_-^{1+\frac{d}{2}} dx. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Il semble alors naturel de se demander quand il existe une borne universelle sur la somme des valeurs propres, en fonction de $\int_{\mathbb{R}^d} V(x)_-^{1+d/2} dx$, de la même façon que nous avons la borne universelle (5.29) sur le nombre de valeurs propres. C'est la célèbre inégalité de Lieb-Thirring, qui a joué un rôle fondamental dans la compréhension mathématique du comportement de la matière fermionique dans la limite d'un grand nombre de particules, c'est-à-dire la stabilité de la matière ordinaire [LT75, LT76, Lie90, LS10].

Théorème 5.52 (Inégalités de Lieb-Thirring). *Soit $V \in L^{\gamma+d/2}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ en dimension $d \geq 1$, avec*

$$\gamma \begin{cases} > 1/2 & \text{si } d = 1, \\ > 0 & \text{si } d = 2, \\ \geq 0 & \text{si } d \geq 3. \end{cases}$$

Alors il existe une constante universelle $C_{\text{LT}}(\gamma, d)$ telle que les valeurs propres négatives ou nulles de l'opérateur $-\Delta + V$ auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$ satisfont l'inégalité

$$\boxed{\sum_j |\lambda_j(-\Delta + V)|^\gamma \leq C_{\text{LT}}(\gamma, d) \int_{\mathbb{R}^d} V(x)_-^{\gamma+\frac{d}{2}} dx,} \quad (5.46)$$

où $V(x)_- = \max(0, -V(x)) \geq 0$ est la partie négative de la fonction V .

Le cas $\gamma = 0$ est l'inégalité CLR (5.29) du théorème 5.46. Pour la preuve du théorème 5.52, voir [LT76, LS10]. Une conjecture célèbre de [LT76] énonce que la meilleure constante dans l'inégalité (5.46) vaut

$$C_{\text{LT}}(1, d) \stackrel{?}{=} \frac{2|\mathbb{S}^{d-1}|}{(2\pi)^d d(d+2)},$$

en toute dimension $d \geq 3$.

Exercices complémentaires

Exercice 5.53 (Laplacien discret). *Dans l'espace de Hilbert $\mathfrak{H} = \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ des suites $\mathbf{x} = (x(k))_{k \in \mathbb{Z}^d}$, on introduit l'opérateur de dérivation discret dans la direction e_j par*

$$(D_j \mathbf{x})(k) = x(k + e_j) - x(k).$$

1. Montrer que D_j est un opérateur borné sur \mathfrak{H} . Quel est son adjoint ?

On introduit alors l'opérateur Laplacien discret défini par

$$L = \sum_{j=1}^d D_j^* D_j,$$

c'est-à-dire

$$(L\mathbf{x})(k) = \sum_{j=1}^d 2x(k) - x(k + e_j) - x(k - e_j).$$

2. Montrer que L est auto-adjoint et que son spectre est inclus dans $[0, \infty)$.

3. On considère l'isométrie $U : \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}' = L^2([0, 1]^d)$ définie par

$$U\mathbf{x} = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} x(k) e^{2i\pi k \cdot x}.$$

Donner une interprétation de U .

4. Calculer UD_jU^* et ULU^* et en déduire le spectre de D_j et L . Ont-ils des valeurs propres ?

On montre maintenant sur un exemple, issu de [RS78, Sec. XIII.4], l'importance de la condition que les opérateurs sont auto-adjoints, dans la théorie de Weyl sur la stabilité du spectre essentiel par perturbations compactes.

On se place en dimension $d = 1$ et on note $S = D + 1$ le décalage à gauche. On considère l'opérateur défini par $(B\mathbf{x})_n = \delta_{0n}x_1$, c'est-à-dire $B = |\delta_0\rangle\langle\delta_1|$.

5. Vérifier que B est compact.

6. Montrer que le spectre essentiel de l'opérateur $S - B$ est tout le disque unité fermé.

Exercice 5.54 ($\sigma_{\text{disc}}(-\Delta + V)$ est fini lorsque $V \in L_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$, $d \geq 1$). On suppose que V est une fonction bornée à support compact, inclus dans la boule $B(0, R)$ de rayon R , en dimension $d \geq 1$.

1. Rappeler pourquoi $-\Delta + V$ est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}^d)$.

2. Considérons le Laplacien de Neumann $(-\Delta)_{\text{Neu}}$ et l'opérateur

$$(-\Delta)_{\text{Neu}} + V$$

sur la boule $B(0, R)$. Rappeler pourquoi cet opérateur est à résolvante compacte et en déduire qu'il admet un nombre fini de valeurs propres négatives.

3. Déduire de l'inégalité

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} V(x)|u(x)|^2 dx \geq \int_{B(0,R)} |\nabla u(x)|^2 dx + \int_{B(0,R)} V(x)|u(x)|^2 dx$$

qu'il existe un espace $W \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ de dimension finie tel que

$$q_{-\Delta+V}(v) \geq 0, \quad \text{pour tout } v \in W^\perp.$$

4. Conclure que $-\Delta + V$ admet un nombre fini de valeurs propres négatives.

Exercice 5.55 (Étude d'un opérateur avec potentiel Coulombien). Soit μ une mesure bornée signée sur \mathbb{R}^3 à support compact, et W un potentiel à valeurs réelles, tel que $W \in L^p(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ pour un $2 \leq p < \infty$.

1. Montrer que l'opérateur

$$H := -\Delta + \mu * \frac{1}{|x|} + W \tag{5.47}$$

est auto-adjoint sur $D(H) = H^2(\mathbb{R}^3) \subset \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$.

2. Montrer que $\sigma_{\text{ess}}(H) = [0, +\infty[$.

3. Si $\mu(\mathbb{R}^3) < 0$ et $2 \leq p \leq 3$, montrer que H possède une infinité de valeurs propres négatives, qui s'accumulent en 0.
4. Si $\mu(\mathbb{R}^3) > 0$ et $W_- \in L^{3/2}(\mathbb{R}^3)$, montrer que H n'a qu'un nombre fini de valeurs propres négatives ou nulles.
5. On suppose $\mu(\mathbb{R}^3) = 0$ et $\int_{\mathbb{R}^3} x d\mu(x) = 0$. Donner le comportement à l'infini de $\mu * |x|^{-1}$ et en déduire que si $W_- \in L^{3/2}(\mathbb{R}^3)$, H n'a qu'un nombre fini de valeurs propres négatives ou nulles.
6. Que dire lorsque $\mu(\mathbb{R}^3) = 0$ et $\int_{\mathbb{R}^3} x d\mu(x) \neq 0$?

Exercice 5.56 (Comportement du Laplacien de Robin à la limite $\theta \rightarrow 1^-$). On considère la réalisation auto-adjointe du Laplacien $A_{\text{Rob},\theta} u = -u''$ avec la condition au bord de Robin

$$D(A_{\text{Rob},\theta}) = \left\{ u \in H^2(]0, 1[) : \begin{aligned} \cos(\pi\theta)u(1) + \sin(\pi\theta)u'(1) &= 0, \\ \cos(\pi\theta)u(0) - \sin(\pi\theta)u'(0) &= 0 \end{aligned} \right\}.$$

comme étudiée aux sections 2.8.2 et 3.2.3. On appelle $\lambda_1(\theta) \leq \lambda_2(\theta) \leq \dots$ les valeurs propres ordonnées de $A_{\text{Rob},\theta}$, répétées en cas de multiplicité.

1. En utilisant la formule de Courant-Fischer, montrer que $\theta \mapsto \lambda_1(\theta)$ est continue et strictement décroissante.
2. Montrer que $\lambda_1(1/2) = 0$ et en déduire que $\lambda_1(\theta) > 0$ pour tout $\theta \in [0, 1/2[$, et que $\lambda_1(\theta) < 0$ pour tout $\theta \in]1/2, 1[$. Énoncer une inégalité de Poincaré pour la forme quadratique de Robin lorsque $\theta \in [0, 1/2[$.
3. Montrer que $\lambda_1(\theta) \rightarrow -\infty$ et $\lambda_2(\theta) \rightarrow -\infty$ quand $\theta \rightarrow 1^-$.
4. Montrer que $\omega^2 \neq 0$ est une valeur propre du Laplacien de Robin A_θ (de fonction propre $\alpha e^{i\omega x} + \beta e^{-i\omega x}$ avec α, β bien choisis) si et seulement si

$$\left(\cos(\pi\theta) + i\omega \sin(\pi\theta) \right)^2 e^{i\omega} = \left(\cos(\pi\theta) - i\omega \sin(\pi\theta) \right)^2 e^{-i\omega}.$$

Montrer que 0 est une valeur propre uniquement pour $\theta = 1/2$ et pour $\theta = 1 - \pi^{-1} \arctan(1/2) \simeq 0,85$. Que se passe-t-il quand $\theta \rightarrow 1^-$?

La courbe de la figure 5.4 représente les trois premières valeurs propres en fonction de θ alors que celle de la figure 5.5 représente la troisième fonction propre pour diverses valeurs de θ .

Exercice 5.57 (Une estimée moins bonne que (5.29)). On suppose que $V \in L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$ et que $d \geq 3$. L'objectif est de prouver une estimée sur le nombre de valeurs propres négatives de (la réalisation de Friedrichs de) l'opérateur $-\Delta + V$.

1. En utilisant le principe de Courant-Fischer (5.22), montrer que le nombre de valeurs propres négatives de $-\Delta + V$ ne peut qu'augmenter lorsqu'on remplace $V(x)$ par sa partie négative $-V(x)_-$, où $a_- := \max(-a, 0)$. De cette façon, on peut toujours supposer que $V \leq 0$, ce que nous faisons dans toute la suite.
2. On considère ensuite l'opérateur

$$K_E = |V(x)|^{1/2} (-\Delta + E)^{-1} |V(x)|^{1/2}$$

En utilisant les mêmes arguments que pour le théorème 5.17, vérifier que K_E est bien défini sur le domaine $D(K_E) = C_c^\infty(\mathbb{R}^d) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$, pour tout $E > 0$, et qu'il est symétrique positif.

3. Montrer que K_E possède un noyau intégral $k_E(x, y) \geq 0$, c'est-à-dire tel que $(K_E u)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} k_E(x, y) u(y) dy$ pour tout $u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ (donner sa formule explicite), et calculer sa limite $k_0 = \lim_{E \rightarrow 0^+} k_E$.

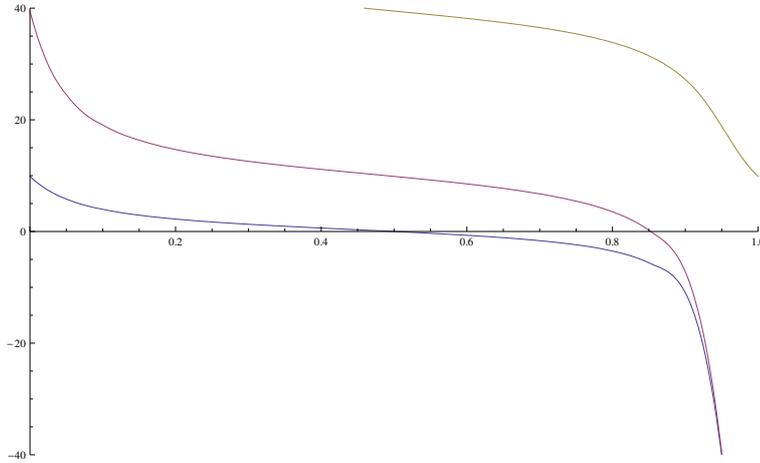


FIGURE 5.4 – Tracé des trois premières valeurs propres $\lambda_1(\theta) \leq \lambda_2(\theta) \leq \lambda_3(\theta)$ du Laplacien de Robin sur l'intervalle $]0, 1[$, en fonction de $\theta \in [0, 1[$.

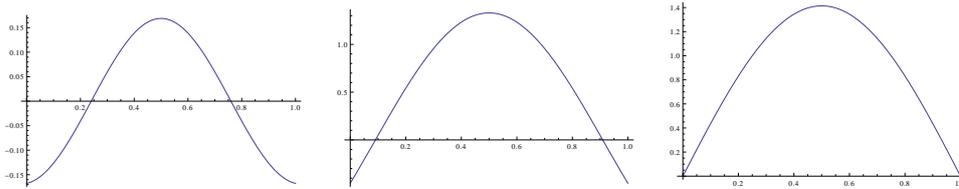


FIGURE 5.5 – Tracé de la troisième fonction propre du Laplacien de Robin sur l'intervalle $]0, 1[$ pour $\theta = 0.7$, pour $\theta = 0.97$ et à la limite $\theta \rightarrow 1^-$.

4. On admet l'inégalité de Hardy-Littlewood-Sobolev [LL01] qui stipule que

$$\|f * |x|^{-s}\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \leq C \|f\|_{L^q(\mathbb{R}^d)} \tag{5.48}$$

lorsque

$$1 < p, q < \infty \quad \text{et} \quad 1 + \frac{1}{p} = \frac{1}{q} + \frac{s}{d}.$$

Montrer que K_E est borné sur $D(K_E) = L_c^\infty(\mathbb{R}^d)$:

$$\forall u \in L_c^\infty(\mathbb{R}^d), \quad \|K_E u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq C \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)},$$

où en plus C ne dépend pas de $E \in \mathbb{R}^+$. En déduire que K_E est essentiellement auto-adjoint pour tout $E \geq 0$, et que son unique extension, encore notée K_E , est définie sur tout $L^2(\mathbb{R}^d)$. Montrer que l'opérateur auto-adjoint K_E ainsi obtenu est compact et positif sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. Dans la suite on note $\lambda_j(E)$ ses valeurs propres (répétées en cas de multiplicité) ordonnées de façon décroissante.

5. En utilisant le principe de Courant-Fischer, montrer que les valeurs propres $\lambda_j(E)$ sont toutes continues et décroissantes par rapport à E sur \mathbb{R}^+ .
6. Montrer que $\lambda \leq 0$ est une valeur propre de la réalisation de Friedrichs de $-\Delta + V$, si et seulement si 1 est une valeur propre de $K_{-\lambda}$, avec les mêmes multiplicités.

7. En déduire que le nombre de valeurs propres négatives de $-\Delta + V$ est inférieur au nombre de valeurs propres ≥ 1 de K_0 :

$$\text{rang} (\mathbf{1}_{]-\infty, 0]}(-\Delta + V)) \leq \text{rang} (\mathbf{1}_{[1; +\infty[}(K_0)).$$

8. Soit A un opérateur auto-adjoint compact positif sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, qui est donné par un noyau intégral positif $k(x, y) \geq 0$ appartenant à $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. Montrer que pour tout entier $n \geq 1$,

$$\int_{(\mathbb{R}^d)^n} k(x_1, x_2)k(x_2, x_3) \cdots k(x_n, x_1) dx_1 \cdots dx_n = \sum_{j \geq 1} \lambda_j(A)^n \geq \text{rang} (\mathbf{1}_{[1; +\infty[}(A)).$$

Calculer le terme de gauche pour $k = k_0$.

9. En dimension $d = 3$, vérifier que l'on peut prendre $n = 2$ et obtenir

$$\text{rang} (\mathbf{1}_{]-\infty, 0]}(-\Delta + V)) \leq C \|V_-\|_{L^{3/2}(\mathbb{R}^3)}^2 \quad (5.49)$$

à l'aide de (5.48).

10. Soit $d \geq 1$, $0 < s < d$ et n un entier tel que $d/(d-s) < n < 2d/(d-s)$. Montrer l'inégalité de Hardy-Littlewood-Sobolev multi-linéaire

$$\begin{aligned} & \iint_{(\mathbb{R}^d)^n} \frac{f(x_1)f(x_2) \cdots f(x_n)}{|x_1 - x_2|^s |x_2 - x_3|^s \cdots |x_{n-1} - x_n|^s |x_n - x_1|^s} dx_1 \cdots dx_n \\ & \leq C \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{f(x)^{n/2} f(y)^{n/2}}{|x - y|^{ns + (2-n)d}} dx dy \leq C' \|f\|_{L^{\frac{d}{d-s}}(\mathbb{R}^d)}^n, \end{aligned} \quad (5.50)$$

pour tout $f \in L^{\frac{d}{d-s}}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^+)$. Pour cela, on pourra écrire la fonction intégrée à gauche comme produit de n fonctions sous la forme

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{f(x_1)f(x_2)}}{|x_2 - x_3|^{\frac{s}{n-1}} \cdots |x_{n-1} - x_n|^{\frac{s}{n-1}} |x_n - x_1|^{\frac{s}{n-1}}} \times \\ & \times \frac{\sqrt{f(x_2)f(x_3)}}{|x_1 - x_2|^{\frac{s}{n-1}} |x_3 - x_4|^{\frac{s}{n-1}} \cdots |x_{n-1} - x_n|^{\frac{s}{n-1}} |x_n - x_1|^{\frac{s}{n-1}}} \times \cdots \\ & \cdots \times \frac{\sqrt{f(x_n)f(x_1)}}{|x_1 - x_2|^{\frac{s}{n-1}} |x_2 - x_3|^{\frac{s}{n-1}} \cdots |x_{n-1} - x_n|^{\frac{s}{n-1}}} \end{aligned}$$

et utiliser l'inégalité de Hölder, suivie du fait que

$$\underbrace{\frac{1}{|x|^{\frac{sn}{n-1}}} * \cdots * \frac{1}{|x|^{\frac{sn}{n-1}}}}_{n-1 \text{ convolutions}} = \frac{C}{|x|^{ns + (2-n)d}}.$$

On vérifiera bien que les hypothèses sur d , s et n garantissent la convergence de toutes les intégrales.

11. En utilisant l'inégalité (5.50) avec $s = d - 2$ et $d \geq 3$, montrer que

$$\text{rang} (\mathbf{1}_{]-\infty, 0]}(-\Delta + V)) \leq C \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{V(x)^{n/2} V(y)^{n/2}}{|x - y|^{2(d-n)}} dx dy \leq C' \|V\|_{L^{\frac{d}{2}}(\mathbb{R}^d)}^n \quad (5.51)$$

pour tout entier n strictement compris entre $d/2$ et d .

Chapitre 6

Application : systèmes à N particules, atomes et molécules

Ce dernier chapitre est une petite excursion dans le monde des opérateurs de Schrödinger décrivant N particules. Il s'agit d'un vaste sujet, très important d'un point de vue physique, pour lequel des questions d'apparence très basique sont parfois encore très peu comprises d'un point de vue mathématique. Nous mentionnons ici quelques résultats de recherche, actuelle ou moins récente, sans toujours fournir toutes les preuves. Nous avons choisi de discuter un peu plus en détail du cas de N électrons dans une molécule dont les noyaux sont des particules classiques.

6.1 Hamiltonien pour N particules, bosons et fermions

Dans cette section nous expliquons comment modéliser un système comprenant plusieurs particules, par exemple les N électrons d'un atome ou d'une molécule.

Nous considérons donc un système de N particules *identiques* qui évoluent dans \mathbb{R}^d , sont soumises à un potentiel extérieur V et qui interagissent par paires avec un potentiel w . L'énergie classique d'un tel système (en supposant $m = 1/2$ pour simplifier) est donnée par

$$E(x_1, p_1, \dots, x_N, p_N) = \sum_{j=1}^N |p_j|^2 + V(x_j) + \sum_{1 \leq j < k \leq N} w(x_j - x_k)$$

où $x_j \in \mathbb{R}^d$ et $p_j \in \mathbb{R}^d$ sont respectivement la position et la quantité de mouvement de la particule n° j . Nous supposons toujours que w est une fonction paire et discuterons plus bas du type d'hypothèse que nous voulons pouvoir couvrir pour cette fonction. Le système quantique associé est posé sur l'espace de Hilbert

$$\mathfrak{H} = L^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C})$$

qui comprend des fonctions d'onde $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ avec l'interprétation que

- $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$ est la densité de probabilité que la particule n° 1 soit en x_1 , que la particule n° 2 soit en x_2 , etc ;

- $|\widehat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)|^2$ est la densité de probabilité que la particule n° 1 ait une quantité de mouvement p_1 , que la particule n° 2 ait une quantité de mouvement p_2 , etc.

Comme pour l'atome d'hydrogène au chapitre 1, l'énergie de ce système dans l'état Ψ est donc donnée par la formule

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^V(\Psi) &= \sum_{j=1}^N \int_{\mathbb{R}^{dN}} |\nabla_{x_j} \Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \\ &\quad + \sum_{j=1}^N \int_{\mathbb{R}^{dN}} V(x_j) |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \\ &\quad + \sum_{1 \leq j < k \leq N} \int_{\mathbb{R}^{dN}} w(x_j - x_k) |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \end{aligned}$$

qui est la forme quadratique associée à l'opérateur Hamiltonien

$$H^V(N) = \sum_{j=1}^N -\Delta_{x_j} + V(x_j) + \sum_{1 \leq j < k \leq N} w(x_j - x_k), \quad (6.1)$$

la quantification de l'énergie classique E . Dans notre notation $H^V(N)$ nous avons indiqué le potentiel extérieur V car celui-ci peut être varié, par exemple en fonction des expériences physiques réalisées, alors que l'interaction w entre les particules est généralement une caractéristique de ces dernières et elle reste fixée dans l'étude.

Nous devons étudier l'opérateur $H^V(N)$ sur l'espace de Hilbert $\mathfrak{H} = L^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C})$. Cependant la situation est un peu plus subtile qu'il n'y paraît. En effet, l'interprétation que nous avons donnée de $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$ et $|\widehat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)|^2$ soulève des questions, puisqu'elle laisse entendre que nous pouvons mettre des étiquettes sur les particules et savoir qui est qui à tout moment. En fait, si nous observons les particules à deux moments différents il est bien sûr impossible de savoir quelle particule est allée où, puisqu'elles sont exactement identiques. Notre modélisation n'est donc pas adéquate et il faut la modifier légèrement.

Il faut que notre modèle soit invariant par toutes les permutations des numéros que l'on peut attribuer aux particules. Nous devrions donc travailler, non pas dans $(\mathbb{R}^d)^N$, mais plutôt dans le quotient

$$(\mathbb{R}^d)^N / \mathfrak{S}_N$$

sous l'action du groupe symétrique $(x_1, \dots, x_N) \mapsto (x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)})$ qui permute les indices. Ce quotient a des propriétés topologiques que nous ne mentionnerons pas et qui jouent un rôle important en dimensions $d = 1, 2$ [LM77]. Nous allons plutôt nous contenter de vérifier que notre modélisation

est à chaque instant invariante sous l'action du groupe symétrique. Nous avons adopté la même stratégie pour l'invariance sous la multiplication par un complexe de module un.

Nous désirons que $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$ et $|\widehat{\Psi}(p_1, \dots, p_N)|^2$ soient symétriques par rapport aux échanges de leurs variables, afin que la numérotation des particules ne joue pas de rôle. Mais par ailleurs nous devons travailler dans un espace vectoriel, de par le formalisme de la mécanique quantique présenté à la section 1.6. Ceci amène naturellement à deux contraintes linéaires possibles sur la fonction Ψ :¹

- soit on travaille avec l'hypothèse que Ψ est *symétrique* par rapport aux échanges de ses variables, c'est-à-dire

$$\Psi(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}) = \Psi(x_1, \dots, x_N), \quad \forall \sigma \in \mathfrak{S}_N ; \quad (6.2)$$

- soit on travaille avec l'hypothèse que Ψ est *anti-symétrique* par rapport aux échanges de ses variables, c'est-à-dire

$$\Psi(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}) = \varepsilon(\sigma) \Psi(x_1, \dots, x_N), \quad \forall \sigma \in \mathfrak{S}_N \quad (6.3)$$

où $\varepsilon(\sigma)$ est la signature de la permutation σ .

Ces deux contraintes impliquent que $|\Psi|^2$ et $|\widehat{\Psi}|^2$ sont symétriques, comme on le désire et, par ailleurs, ce sont des contraintes linéaires qui imposent simplement de travailler dans les sous-espaces fermés correspondants de $L^2((\mathbb{R}^d)^N)$, que nous noterons dans la suite

$$L_s^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) := \left\{ \Psi \in L^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) \text{ vérifiant (6.2) p.p.} \right\} \quad (6.4)$$

et

$$L_a^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) := \left\{ \Psi \in L^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) \text{ vérifiant (6.3) p.p.} \right\} \quad (6.5)$$

et qui seront bien sûr munis de la norme habituelle de $L^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C})$. De façon similaire, on peut définir les espaces de Sobolev $H_{a/s}^k((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C})$.

Le choix de la condition de symétrie ou d'anti-symétrie dépend du type de particule étudié. Celles qui sont modélisées par des Ψ symétriques s'appellent des *bosons*, alors que celles pour lesquelles Ψ est anti-symétrique s'appellent des *fermions*. Le modèle standard nous apprend que toutes les particules fondamentales composant la matière sont des fermions (exemples : électron, quark), alors que toutes les particules permettant les échanges d'énergie sont des bosons (exemples : photon, gluon, Higgs).

Il est souvent commode de décrire des particules *composites* (comprenant plusieurs particules élémentaires) comme une seule entité, en fonction

1. En adoptant une vision plus topologique et en travaillant dans le quotient, on peut voir qu'en dimension $d = 1$ et $d = 2$, il y a d'autres possibilités, décrites dans [LM77], mais pour lesquelles Ψ n'est plus vraiment une fonction.

de l'échelle à laquelle étudie son comportement. Par exemple, lors de notre étude de l'électron dans l'atome d'hydrogène, nous avons supposé que le proton était une particule classique et fixe. Nous pouvons aussi décrire ce dernier de façon quantique, comme à l'exemple 1.29. Cependant, nous oublions ici que le proton contient en fait trois quarks, et également qu'il existe des isotopes de l'hydrogène qui ont aussi des neutrons, eux-mêmes étant composés de trois quarks. Le modèle choisi peut donc être complexifié en fonction de l'échelle à laquelle on étudie le système.

Pour une particule composite, la règle est que seul le nombre de fermions compte pour déterminer son type. C'est un boson si le nombre de fermions élémentaires est pair et un fermion sinon. Par exemple, les protons et neutrons, qui sont composés de trois quarks sont des fermions. L'Hélium 4 (2 électrons, 2 protons et 2 neutrons) se comporte comme un boson alors que l'Hélium 3 (2 électrons, 2 protons et 1 neutron), beaucoup plus rare sur terre, se comporte comme un fermion. Cette règle est assez intuitive, puisque si on regroupe les variables d'une fonction d'onde, et qu'on observe le signe qui apparaît lorsqu'on échange ces groupes de variables, on voit immédiatement qu'il dépend seulement de la parité du nombre de variable dans chaque groupe.²

Tant que N est fini, il n'y a pas toujours de différence flagrante dans les propriétés mathématiques entre les modèles fermioniques et bosoniques. Par contre, le Hamiltonien $H^V(N)$ se comporte souvent de façon très différente à la limite $N \rightarrow \infty$ selon s'il est restreint aux sous-espaces des fonctions symétriques ou anti-symétriques. Les systèmes bosoniques peuvent être plus instables que les systèmes fermioniques lorsque le nombre de particules grandit. Pour le cas Coulombien qui nous intéresse tout particulièrement, seuls les systèmes fermioniques sont stables à la limite $N \rightarrow \infty$, ce qui explique probablement pourquoi la matière est composée de fermions élémentaires.

L'idée intuitive est que les bosons sont des particules très sociables qui aiment être ensemble. Par exemple, on peut mettre toutes les particules dans le même état $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ en prenant

$$\Psi_{\text{BEC}}(x_1, \dots, x_N) = u(x_1) \cdots u(x_N)$$

qui s'appelle un *condensat de Bose-Einstein*. Ceci est impossible pour les fermions. L'anti-symétrie de Ψ est souvent appelée *principe de Pauli* et elle implique, par exemple, que deux fermions ne peuvent jamais être au même endroit. En effet, si Ψ est une fonction continue, on a

$$\Psi(x_1, \dots, x, \dots, x, \dots, x_N) = 0.$$

La question de comprendre l'implication mathématique du principe de Pauli

2. Par exemple, un système comprenant quatre fermions est décrit par une fonction d'onde anti-symétrique $\Psi(x_1, x_2, x_3, x_4)$ et comme $\Psi(x_1, x_2, x_3, x_4) = \Psi(x_3, x_4, x_1, x_2)$ on trouve bien que les paires de fermions se comportent comme des bosons.

sur la stabilité des systèmes quantiques à la limite $N \rightarrow \infty$ a beaucoup occupé les mathématiciens ces dernières années.

Alors que les électrons interagissent avec le potentiel de Coulomb (en négligeant les forces faibles), les particules composites ont une interaction complexe qui ne peut être déterminée qu'empiriquement, puisqu'elle émane de leur structure interne. Il est fréquent de la décrire par un potentiel d'interaction par paires w comme dans cette section. On suppose souvent dans ce cas que w a la forme présentée à la figure 6.1, avec une assez forte répulsion à l'origine et une faible attraction à l'infini. Pour les atomes l'attraction décroît au plus comme $-1/|x|^6$ qui est le potentiel de Van Der Waals, mais elle peut décroître plus lentement, par exemple si les atomes peuvent se polariser. En tous cas, il est important que la théorie mathématique soit assez flexible du point de vue des hypothèses sur les potentiels V et w , qui ne sont pas toujours connus exactement.

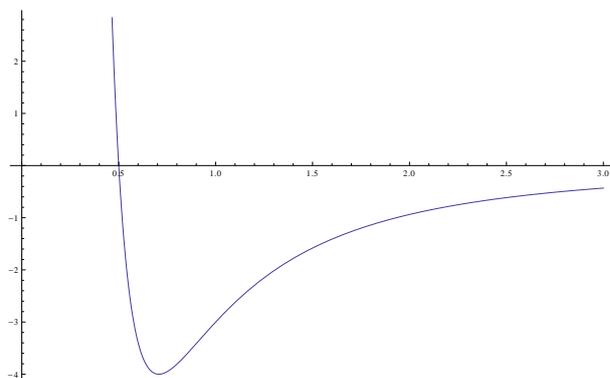


FIGURE 6.1 – Forme typique de l'interaction empirique w pour des atomes.

Nous étudierons plus en détail le cas des électrons dans les atomes et les molécules à la section 6.5. Dans l'approximation de Born-Oppenheimer, une molécule comprend

- N électrons quantiques
- M noyaux classiques fixes, de charges z_1, \dots, z_M et situés en $R_1, \dots, R_M \in \mathbb{R}^3$.

Les M noyaux induisent le potentiel de Coulomb extérieur

$$V(x) = - \sum_{m=1}^M \frac{z_m}{|x - R_m|}$$

qui est ressenti par les N électrons du système. Par ailleurs, les N électrons interagissent entre eux avec la répulsion Coulombienne

$$\sum_{1 \leq j < k \leq N} \frac{1}{|x_j - x_k|}$$

qui correspond par conséquent à

$$w(x) = \frac{1}{|x|}.$$

Nous travaillons ici à nouveau dans un système d'unité où $e^2/(4\pi\epsilon_0) = 2m = 1$. Le Hamiltonien décrivant les N électrons est donc

$$H_{\text{mol}} = -\sum_{j=1}^N \Delta_{x_j} - \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^M \frac{z_m}{|x_j - R_m|} + \sum_{1 \leq j < k \leq N} \frac{1}{|x_j - x_k|} \quad (6.6)$$

et il doit être étudié sur $L_a^2((\mathbb{R}^3)^N, \mathbb{C})$ puisque les électrons sont des fermions. Ici nous n'avons pas tenu compte de la répulsion Coulombienne entre les noyaux

$$\sum_{1 \leq \ell < m \leq M} \frac{z_\ell z_m}{|R_\ell - R_m|}$$

car c'est une constante, tant que ces derniers restent immobiles. Il faut bien sûr l'ajouter si on fait varier les positions des noyaux et que l'on compare les énergies obtenues.

Il est assez surprenant que l'opérateur (6.6) décrive tous les atomes du tableau périodique et toutes les molécules en allant de petits objets comme la molécule d'eau H_2O à des macro-molécules comme l'ADN. C'est l'une des plus grandes réussites de la mécanique quantique. L'opérateur H_{mol} dont la formule tient sur une ligne est supposé décrire les comportements physiques variés et complexes de tous ces objets. Il faut cependant tempérer un enthousiasme trop prononcé, car réaliser des prédictions concrètes et précises avec l'opérateur (6.6) se révèle d'une extraordinaire difficulté, à cause de la très grande dimension de l'espace \mathbb{R}^{3N} dans lequel agit cet opérateur.

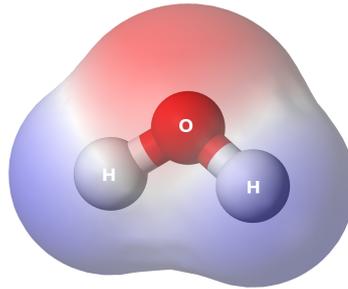


FIGURE 6.2 – Pour la molécule d'eau, on a $z_1 = z_2 = 1$, $z_3 = 8$ et $N = 10$.

6.2 Auto-adjonction

Dans cette section nous allons maintenant montrer que l'opérateur $H^V(N)$ défini en (6.1) est auto-adjoint sur $H_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C})$, sous des conditions phy-

siquement très raisonnables sur les potentiels V et w . Nous travaillons en dimension $d \geq 1$ quelconque. Malheureusement nous ne pouvons pas appliquer le théorème 3.5 dans \mathbb{R}^{dN} . Le potentiel total

$$\sum_{j=1}^N V(x_j) + \sum_{1 \leq j < k \leq N} w(x_j - x_k)$$

n'est dans aucun $L^p(\mathbb{R}^{dN})$ car il fait intervenir des fonctions qui ne dépendent que d'une ou deux variables à la fois. Par ailleurs, l'utilisation de l'injection de Sobolev en dimension dN nous amènerait naturellement à utiliser l'espace $L^{dN/2}(\mathbb{R}^{dN})$ qui a une très mauvaise dépendance par rapport à N . La forme très spéciale de l'opérateur $H^V(N)$ permet cependant de montrer l'auto-adjonction avec les mêmes hypothèses sur V et w que dans \mathbb{R}^d , donc de façon totalement *indépendante du nombre N de particules*.

Rappelons que l'opérateur $H^V(1) = -\Delta + V(x)$ est auto-adjoint sur $D(H^V(1)) = H^2(\mathbb{R}^d)$ lorsque $V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^\infty(\mathbb{R}^d)$, avec

$$\begin{cases} p = 2 & \text{si } d = 1, 2, 3, \\ p > 2 & \text{si } d = 4, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 5, \end{cases} \quad (6.7)$$

(théorème 3.5). Le résultat suivant signifie que $H^V(N)$ est auto-adjoint sur $H_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^N)$ pour tout $N \geq 1$, avec la même condition.

Théorème 6.1 (Opérateurs à N corps : auto-adjonction). *On suppose que V et w sont dans $L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec p satisfaisant l'hypothèse (6.7). On suppose également que w est paire. Alors, pour tout $N \geq 2$, l'opérateur $H^V(N)$ est auto-adjoint sur*

$$D(H^V(N)) = \begin{cases} H^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) \subset L^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) & \text{(pas de symétrie),} \\ H_s^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) \subset L_s^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) & \text{(bosons),} \\ H_a^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) \subset L_a^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) & \text{(fermions),} \end{cases}$$

et son spectre est minoré dans chacun de ces trois cas.

Démonstration. L'opérateur $-\Delta$ est auto-adjoint sur $H^2((\mathbb{R}^d)^N)$, comme nous l'avons vu au corollaire 2.42. Comme les sous-espaces $H_s^2((\mathbb{R}^d)^N)$ et $H_a^2((\mathbb{R}^d)^N)$ sont fermés dans $H^2((\mathbb{R}^d)^N)$ et qu'ils sont stables par $-\Delta$, on peut voir que $-\Delta$ reste auto-adjoint lorsqu'il est restreint à ces deux sous-espaces. Simplement, l'équation $(1 - \Delta)\Psi = \Phi$ qui admet une unique solution Ψ pour tout $\Phi \in L^2((\mathbb{R}^d)^N)$ vérifie $\Psi \in H_{s/a}^2((\mathbb{R}^d)^N)$ dès lors que $\Phi \in L_{s/a}^2((\mathbb{R}^d)^N)$ (l'écrire en Fourier). D'après le théorème 2.36, ceci montre l'auto-adjonction de $-\Delta$ sur les deux sous-espaces $H_{s/a}^2((\mathbb{R}^d)^N)$, avec le même spectre (exercice 6.2).

Par le théorème 3.1 de Rellich-Kato il suffit donc de montrer que chacun des termes apparaissant dans la définition du potentiel total est infinitésimalement $(-\Delta)$ -borné. Nous commençons par exemple par la fonction $V(x_1)$ et calculons donc

$$\begin{aligned} \|V(x_1)\Psi\|_{L^2}^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \left(\int_{\mathbb{R}^d} V(x_1)^2 |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \right) \cdots dx_N \\ &\leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} |\Delta_{x_1} \Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \\ &\quad + C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N. \end{aligned}$$

Nous avons ici utilisé l'inégalité (3.4) dans la variable x_1 en fixant toutes les autres variables x_2, \dots, x_N , ce qui est autorisé par Fubini. Comme

$$\begin{aligned} \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |\Delta_{x_1} \Psi|^2 &= \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |k_1|^4 |\widehat{\Psi}|^2 \\ &\leq \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \left(\sum_{j=1}^d |k_j|^2 \right)^2 |\widehat{\Psi}|^2 = \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |\Delta \Psi|^2, \end{aligned}$$

ceci montre bien que $V(x_1)$ est infinitésimalement $(-\Delta)$ -borné. L'argument est évidemment exactement le même pour $V(x_j)$.

Il reste à traiter l'interaction. Nous commençons par remarquer que dans l'inégalité (3.4), le terme de droite est invariant par translations alors que celui de gauche ne l'est pas. En remplaçant f par $f(\cdot + R)$, nous obtenons donc

$$\|V(\cdot - R)f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \varepsilon \|f\|_{H^2(\mathbb{R}^d)} + C_\varepsilon \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}, \quad \forall f \in H^2(\mathbb{R}^d), \quad \forall R \in \mathbb{R}^d. \quad (6.8)$$

Nous avons utilisé la même astuce dans la preuve de l'inégalité de Kato au corollaire 1.7. Ainsi, nous pouvons maintenant écrire

$$\begin{aligned} \|w(x_1 - x_2)\Psi\|_{L^2}^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \left(\int_{\mathbb{R}^d} w(x_1 - x_2)^2 |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \right) \cdots dx_N \\ &\leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} |\Delta_{x_1} \Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \\ &\quad + C_\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \end{aligned}$$

où nous avons utilisé (6.8) avec $R = x_2$, toujours en fixant x_2, \dots, x_N par le théorème de Fubini. Ceci montre bien que tous les termes du potentiel sont infinitésimalement $-\Delta$ -bornés, donc que le potentiel total l'est. Le comportement en N de nos estimées est assez mauvais, mais ceci n'a pas d'importance ici puisqu'on peut prendre ε aussi petit que l'on veut.

Les arguments précédents peuvent être adaptés à $\int_{(\mathbb{R}^d)^N} V(x_j) |\Psi|^2$ et $\int_{(\mathbb{R}^d)^N} w(x_j - x_k) |\Psi|^2$. Comme au théorème 3.5, nous pouvons également obtenir une estimée sur l'énergie totale sous la forme

$$\mathcal{E}^V(\Psi) \geq (1 - \varepsilon) \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |\nabla \Psi|^2 - C_\varepsilon \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |\Psi|^2 \quad (6.9)$$

qui prouve que le spectre est borné inférieurement, par le corollaire 2.41. \square

Exercice 6.2 (Laplacien : bosons et fermions). *Montrer que le spectre de l'opérateur auto-adjoint $-\Delta$ défini sur $H_s^2((\mathbb{R}^d)^N)$ et $H_a^2((\mathbb{R}^d)^N)$ est encore égal à $[0, +\infty[$.*

Exercice 6.3 (Atomes et molécules). *En utilisant l'inégalité de Kato (1.22), trouver le comportement de la constante C_ε en fonction de ε , N , M (le nombre de noyaux) et $\max(|z_m|)$ (la charge maximale des noyaux), pour l'opérateur (6.6).*

Avec l'hypothèse plus faible $V \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ où

$$\begin{cases} p = 1 & \text{si } d = 1, \\ p > 1 & \text{si } d = 2, \\ p = \frac{d}{2} & \text{si } d \geq 3, \end{cases} \quad (6.10)$$

nous avons pu construire au corollaire 3.24 la *réalisation de Friedrichs* de l'opérateur $H^V(1) = -\Delta + V$, dont le domaine est donné par

$$D(-\Delta + V) = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^d) : (-\Delta + V)u \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}.$$

La même preuve que celle du théorème 6.1 précédent permet d'en déduire le résultat suivant.

Théorème 6.4 (Opérateurs à N corps : auto-adjonction II). *On suppose que V et w sont dans $L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec p satisfaisant l'hypothèse (6.10). On suppose également que w est paire. Alors, pour tout $N \geq 2$, l'opérateur $H^V(N)$ est auto-adjoint sur*

$$D(H^V(N)) = \left\{ \Psi \in Q(H^V(N)) : H^V(N)\Psi \in L^2((\mathbb{R}^d)^N) \right\}$$

où

$$Q(H^V(N)) = \begin{cases} H^1((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) \subset L^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) & \text{(pas de symétrie),} \\ H_s^1((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) \subset L_s^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) & \text{(bosons),} \\ H_a^1((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) \subset L_a^2((\mathbb{R}^d)^N, \mathbb{C}) & \text{(fermions),} \end{cases}$$

et son spectre est minoré dans chacun de ces trois cas.

Il y a bien sûr des résultats similaires pour des potentiels tendant vers l'infini à l'infini ou satisfaisant les hypothèses de la section 3.3.

6.3 Spectre essentiel : théorème HVZ

Le théorème suivant fournit la forme générale du spectre essentiel des opérateurs à N particules. Nous appelons

$$E_{a/s}^V(N) := \min \sigma(H_{a/s}^V(N))$$

le bas du spectre (qui peut être une valeur propre ou pas), et

$$\Sigma_{a/s}^V(N) := \min \sigma_{\text{ess}}(H_{a/s}^V(N))$$

le bas du spectre essentiel.

Théorème 6.5 (HVZ). *Supposons que $V, w \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$, avec p satisfaisant (6.10), tendent vers 0 à l'infini. On suppose aussi que w est paire. Alors le spectre essentiel est une demi-droite*

$$\sigma_{\text{ess}} \left(H^V(N) |_{L_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^N)} \right) = [\Sigma_{a/s}^V(N); +\infty[\quad (6.11)$$

avec

$$\Sigma_{a/s}^V(N) = \min \left\{ E_{a/s}^V(N-k) + E_{a/s}^0(k), k = 1, \dots, N \right\}. \quad (6.12)$$

Si $V \equiv 0$, on a

$$E_{a/s}^V(N) = \Sigma_{a/s}^V(N) = \min \left\{ E_{a/s}^V(N-k) + E_{a/s}^0(k), k = 1, \dots, N-1 \right\}. \quad (6.13)$$

La formule (6.12) a été prouvée par Zhislin [Zhi60], Van Winter [Van64] et Hunziker [Hun66] dans les années 60. Elle signifie que le bas du spectre essentiel commence lorsque k particules ont été arrachées du système, alors que $N-k$ restent dans un voisinage du support de V . L'énergie minimale d'un tel système est la somme de celle des $N-k$ particules restantes $E^V(N-k)$ et de l'énergie $E^0(k)$ des particules qui se sont échappées, et qui ne voient plus le potentiel V (ce dernier tend vers 0 à l'infini par hypothèse). Il faut ensuite chercher quel est le nombre optimal k de particules à envoyer à l'infini pour que l'énergie obtenue soit la plus petite possible, d'où le minimum sur $k = 1, \dots, N$.

Lorsque $V \equiv 0$, il n'y a jamais de valeur propre et, comme énoncé en (6.13), il faut enlever le cas $k = N$ dans (6.12) car sinon la formule n'apporte rien.

Si le résultat est assez intuitif, la preuve de (6.12) et (6.13) n'est pas si simple puisque les trois nombres $\Sigma_{a/s}^V(N)$, $E^V(N-k)$ et $E^0(k)$ que l'on doit comparer concernent des opérateurs définis sur des espaces $L_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^N)$, $L_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^{N-k})$ et $L_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^k)$ différents. La structure de produit tensoriel

joue alors un rôle fondamental. L'idée sous-jacente au théorème est que toute suite de Weyl (Ψ_n) associée à $\Sigma_{a/s}^V(N)$, c'est-à-dire telle que $\|\Psi_n\| = 1$, $\Psi_n \rightharpoonup 0$ et

$$\left(H^V(N) - \Sigma_{a/s}^V(N)\right) \Psi_n \rightarrow 0,$$

doit se comporter comme

$$\Psi_n(x_1, \dots, x_N) \simeq \Phi(x_1, \dots, x_{N-k}) \Phi'_n(x_{N-k+1}, \dots, x_N) \quad (6.14)$$

(qu'il faut aussi symétriser ou anti-symétriser), où Φ est la première fonction propre de $H^V(N-k)$, en supposant qu'elle existe, et $\Phi'_n \rightharpoonup 0$ est une suite de Weyl associée à $E^0(k)$. La difficulté est qu'un tel produit tensoriel converge toujours faiblement vers 0, même si Φ est fixe, ce qui empêche l'utilisation de la convergence faible usuelle pour déterminer l'état Φ des particules qui ne s'échappent pas. En fait, une bonne manière pour décrire le comportement des particules qui restent consiste justement à changer de topologie faible [Lew11].

Le cas où $w \geq 0$ est plus simple et c'est celui qui nous concernera le plus lorsque nous étudierons les électrons, pour lesquels $w(x) = 1/|x|$ en dimension $d = 3$.

Corollaire 6.6 (HVZ pour les systèmes répulsifs). *Supposons que $V, w \in L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ avec p satisfaisant (6.10) tendent vers 0 à l'infini et que*

$$w \geq 0$$

est une fonction paire. Alors on a $E^0(N) = 0$ pour tout $N \geq 1$ et

$$\boxed{\Sigma_{a/s}^V(N) = E_{a/s}^V(N-1)}. \quad (6.15)$$

Démonstration. Lorsqu'il n'y a pas de confusion possible, nous supprimons l'indice a/s . Lorsque $w \geq 0$, la forme quadratique associée \mathcal{E}^0 est positive, donc $E^0(N) \geq 0$. En prenant une fonction test sous la forme

$$\Psi_n(x_1, \dots, x_N) = n^{-Nd/2} \Psi(x_1/n, \dots, x_N/n)$$

où $\Psi \in C_c^\infty$, on trouve

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^0(\Psi_n) &= \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^{dN}} |\nabla \Psi|^2 \\ &\quad + \sum_{1 \leq j < k \leq N} \int_{\mathbb{R}^{dN}} w(n(x_j - x_k)) |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \end{aligned}$$

qui tend vers 0 et montre donc que $E^0(N) = 0$. Par le théorème HVZ nous avons $E^V(N) \leq \Sigma^V(N) \leq E^V(N-1)$ car $E^0(1) = 0$ donc $N \mapsto E^V(N)$ est

décroissante. Ainsi, $E^V(N-k) + E^0(k) = E^V(N-k) \geq E^V(N-1)$ pour tout $k = 1, \dots, N$ et

$$\Sigma^V(N) = \min\{E^V(N-k) + E^0(k), k = 1, \dots, N\} = E^V(N-1).$$

□

Nous allons maintenant donner la preuve détaillée du théorème HVZ (sauf (6.13)). L'argument est inspiré de [Fri03, Lew11].

Preuve du théorème 6.5. Pour simplifier nous écrivons la preuve dans le cas où les potentiels V et w satisfont l'hypothèse (6.7), sous laquelle le domaine de $H^V(N)$ est $H_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^N)$. C'est un cas plus simple car chaque terme du Hamiltonien est dans L^2 séparément. La preuve dans le cas général se fait par une méthode d'approximation, c'est-à-dire en approchant V et w par des potentiels plus lisses. On peut utiliser la formule (5.8) pour montrer que le bas du spectre essentiel $\Sigma_{a/s}^V(N)$ dépend de façon continue des potentiels V et w dans les espaces correspondants.

Nous divisons la preuve en plusieurs étapes. Pour simplifier les notations, nous ne mettons généralement pas les indices a/s , sauf en cas d'ambiguïté.

Étape 1 : preuve que $\sigma(H^0(N)) = [E^0(N), +\infty[$. Nous commençons par montrer que le spectre de $H^0(N)$ (lorsque $V \equiv 0$) est une demi-droite, c'est-à-dire que

$$\sigma(H^0(N)) = \sigma_{\text{ess}}(H^0(N)) = [E^0(N), +\infty[.$$

Pour cela nous allons utiliser l'invariance par translation de $H^0(N)$ et le fait qu'on peut donner une vitesse arbitraire au centre de masse du système. Une technique classique pour étudier l'opérateur $H^0(N)$ est de changer de variable en posant, par exemple,

$$X = \frac{x_1 + \dots + x_N}{N}, \quad x'_1 = x_1 - x_N, \quad \dots \quad x'_{N-1} = x_{N-1} - x_N.$$

Comme nous n'avons pas étudié les opérateurs de ce type auparavant, nous allons utiliser ici un argument légèrement différent, quoique du même type.

L'opérateur $H^0(N)$ commute avec les translations arbitraires de tout le système, c'est-à-dire sous la forme

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) \mapsto \Psi(x_1 - \tau, \dots, x_N - \tau)$$

avec $\tau \in \mathbb{R}^d$. Si on se fixe une direction $\omega \in \mathbb{S}^{d-1}$, les translations $\tau = t\omega$ dans cette direction forment un groupe à un paramètre d'unitaires, fortement continu. Comme vu à la section 4.7.2, le générateur infinitésimal de ce groupe est donné par l'opérateur

$$\omega \cdot P := -i \sum_{j=1}^N \omega \cdot \nabla_{x_j},$$

qui est auto-adjoint sur l'espace de type Sobolev

$$\left\{ \Psi \in L^2_{a/s}((\mathbb{R}^d)^N) : \omega \cdot P \Psi \in L^2_{a/s}((\mathbb{R}^d)^N) \right\},$$

contenant $D(H^0(N))$. Nous en déduisons que $H^0(N)$ et $\omega \cdot P$ commutent, au sens vu à la section 4.8, c'est-à-dire que $[f(H^0(N)), g(\omega \cdot P)] = 0$ pour toutes fonctions f, g continues bornées. Nous prétendons alors qu'il existe une suite de Weyl $(\Phi_n) \subset D(H^0(N))$ et $\lambda \in \mathbb{R}$ telle que $\|\Phi_n\|_{L^2} = 1$,

$$(H^0(N) - E^0(N)) \Phi_n \rightarrow 0 \quad \text{et} \quad (\omega \cdot P - \lambda) \Phi_n \rightarrow 0. \quad (6.16)$$

En effet, nous pouvons considérer l'image du projecteur spectral

$$\mathbb{1}_{[E^0(N), E^0(N)+1/n]}(H^0(N))$$

qui est invariante par tous les $g(\omega \cdot P)$ et incluse dans $D(H^0(N))$ donc dans le domaine de $\omega \cdot P$. Ceci implique que cet espace est également invariant par $\omega \cdot P$ et on peut trouver Φ_n normalisée telle que

$$\|(\omega \cdot P - \lambda_n) \Phi_n\| \leq 1/n$$

où λ_n est un point quelconque du spectre de la restriction de $\omega \cdot P$. Comme Φ_n est alors une suite de Weyl pour $H^0(N)$, elle est bornée dans $H^1((\mathbb{R}^d)^N)$ (même dans $H^2((\mathbb{R}^d)^N)$ sous nos hypothèses sur V et w), ce qui implique que λ_n est bornée et une extraction de sous-suite fournit la suite Φ_n souhaitée.

L'argument précédent s'applique à n'importe quel point du spectre de $H^0(N)$. Maintenant nous allons montrer que pour $E^0(N)$, on a nécessairement $\lambda = 0$, ce qui signifie physiquement que le centre de masse ne peut avoir de vitesse à l'énergie fondamentale. Pour cela, nous allons modifier Φ_n pour donner une impulsion à son centre de masse d'intensité $k \in \mathbb{R}$ dans la direction ω . Nous définissons

$$\Phi'_n(x_1, \dots, x_N) = \Phi_n(x_1, \dots, x_N) e^{ik\omega \cdot (x_1 + \dots + x_N)}.$$

Un calcul montre que

$$H^0(N) \Phi'_n = e^{ik\omega \cdot (x_1 + \dots + x_N)} \left(H^0(N) \Phi_n + 2ik \sum_{j=1}^N \omega \cdot \nabla_{x_j} \Phi_n + k^2 \Phi_n \right).$$

En utilisant (6.16), nous en déduisons que

$$\left(H^0(N) - (E^0(N) - 2k\lambda + k^2) \right) \Phi'_n \rightarrow 0,$$

c'est-à-dire que Φ'_n est une suite de Weyl associée à $E^0(N) - 2k\lambda + k^2$. En particulier,

$$E^0(N) - 2k\lambda + k^2 \in \sigma(H^0(N))$$

pour tout $k \in \mathbb{R}$. Si $\lambda \neq 0$, on a $E^0(N) - 2k\lambda + k^2 < E^0(N)$ pour k assez petit du même signe que λ , ce qui contredit le fait que $E^0(N)$ est le minimum du spectre. Donc $\lambda = 0$ et en faisant varier k on trouve, comme annoncé, que

$$[E^0(N); +\infty[\subset \sigma(H^0(N)).$$

On a donc égalité, par définition de $E^0(N)$.

Étape 2 : preuve de la borne supérieure. Nous allons maintenant montrer que

$$\left[\min_{k=1, \dots, N} \{E^V(N-k) + E^0(k)\}, +\infty[\subset \sigma_{\text{ess}}(H^V(N)),$$

et en particulier l'inégalité \leq dans (6.12). Soit $k \in \{1, \dots, N\}$ et $(\Phi_n) \subset H_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^{N-k})$, $(\Phi'_n) \subset H_{a/s}^2((\mathbb{R}^d)^k)$ des suites de Weyl pour, respectivement, $E^V(N-k)$ et $\lambda \in [E^0(k); +\infty[$, c'est-à-dire telles que

$$\|\Phi_n\|_{L^2} = \|\Phi'_n\|_{L^2} = 1$$

et

$$(H^V(N-k) - E^V(N-k)) \Phi_n \rightarrow 0, \quad (H^0(k) - \lambda) \Phi'_n \rightarrow 0.$$

Nous utilisons ici le fait que le spectre de $H^0(k)$ a été déterminé à l'étape 1. Comme C_c^∞ est dense dans $H_{a/s}^2$, nous pouvons supposer que Φ_n, Φ'_n sont dans C_c^∞ (sans estimée précise sur la taille du support). Nous introduisons alors

$$\Psi_n(x_1, \dots, x_N) := \Phi_n(x_1, \dots, x_{N-k}) \Phi'_n(x_{N-k+1} - R_n\omega, \dots, x_N - R_n\omega)$$

où R_n est choisi suffisamment grand de sorte que la distance entre les supports des deux fonctions soit au moins égale à n , et aussi de sorte que la distance entre le support de $\Phi'_n(\cdot - R_n\omega)$ et l'origine soit au moins égale à n . Dit autrement, nous plaçons $N-k$ particules proches du potentiel V dans l'état Φ_n et les autres k particules très loin à distance R_n dans la direction $\omega \in \mathbb{S}^{d-1}$, dans l'état Φ'_n . Nous utilisons ici l'invariance de $H^0(k)$ sous les translations globales de tout le système, comme discutée à l'étape 1.

La fonction Ψ_n n'est ni symétrique ni anti-symétrique. Nous pouvons la symétriser en posant

$$\Psi_n^s := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \Psi_n(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}) \quad (6.17)$$

et l'anti-symétriser en posant

$$\Psi_n^a := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \varepsilon(\sigma) \Psi_n(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}). \quad (6.18)$$

Ces deux sommes ont beaucoup de redondance car les permutations des variables $\{1, \dots, N - k\}$ et $\{N - k + 1, \dots, N\}$ ne sont pas utiles, puisque Φ_n et Φ'_n sont déjà (anti-)symétriques. Lorsqu'on échange deux variables des deux groupes on génère des fonctions à support disjoint, puisque Φ_n et $\Phi'_n(\cdot - R_n\omega)$ sont elles mêmes à support disjoint. Un calcul montre alors que

$$\left\| \Psi_n^{a/s} \right\| = 1.$$

Ainsi, par linéarité nous pouvons nous contenter de prouver que

$$(H^V(N) - E^V(N - k) - \lambda) \Psi_n \rightarrow 0$$

car $H^V(N)$ est invariant par les permutations des x_j .

Pour montrer cette convergence, nous partons de la formule de l'opérateur $H^V(N)$ et séparons les variables en deux groupes de la façon suivante :

$$\begin{aligned} H^V(N) &= \sum_{j=1}^{N-k} -\Delta_{x_j} + V(x_j) + \sum_{1 \leq j < \ell \leq N-k} w(x_j - x_\ell) \\ &+ \sum_{j=N-k+1}^N -\Delta_{x_j} + \sum_{N-k+1 \leq j < \ell \leq N} w(x_j - x_\ell) \\ &+ \sum_{\ell=N-k+1}^N V(x_\ell) + \sum_{j=1}^{N-k} \sum_{\ell=N-k+1}^N w(x_j - x_\ell). \end{aligned} \quad (6.19)$$

Ceci montre que

$$\begin{aligned} &(H^V(N) - E^V(N - k) - \lambda) \Psi_n \\ &= ((H^V(N_k) - E^V(N - k))\Phi_n) \otimes \Phi'_n + \Phi_n \otimes ((H^0(k) - \lambda)\Phi'_n) \\ &+ \sum_{j=N-k+1}^N V(x_j)\Psi_n + \sum_{j=1}^{N-k} \sum_{\ell=N-k+1}^N w(x_j - x_\ell)\Psi_n. \end{aligned}$$

Sur le support de Ψ_n , nous avons

$$|x_\ell| \geq n \quad \text{et} \quad |x_j - x_\ell| \geq n$$

par choix de R_n , lorsque $\ell \geq N - k + 1$ et $j \leq N - k$. Ceci montre que

$$\begin{aligned} &\left\| (H^V(N) - E^V(N - k) - \lambda) \Psi_n \right\| \\ &\leq \left\| ((H^V(N_k) - E^V(N - k))\Phi_n) \right\| + \left\| ((H^0(k) - \lambda)\Phi'_n) \right\| \\ &+ k \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0, n))} + (N - k)k \|w\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0, n))}. \end{aligned}$$

Puisque $V, w \rightarrow 0$ à l'infini par hypothèse, nous concluons bien que Ψ_n (symétrisée ou anti-symétrisée comme ci-dessus) est une suite de Weyl associée à $E^V(N - k) + \lambda$, et finalement que

$$[E^V(N - k) + E^0(k), +\infty[\subset \sigma_{\text{ess}}(H^V(N)),$$

pour tout $k = 1, \dots, N$. En particulier,

$$\Sigma^V(N) \leq \min_{k=1, \dots, N} \{E^V(N-k) + E^0(k)\}.$$

Étape 3 : preuve de la borne inférieure. Il reste à prouver que

$$\Sigma^V(N) \geq \min_{k=1, \dots, N} \{E^V(N-k) + E^0(k)\}.$$

C'est la partie la plus difficile de l'argument. Pour cela, nous allons devoir examiner toutes les façons dont une suite de Weyl arbitraire Ψ_n peut perdre de la compacité, et montrer que des particules doivent partir à l'infini. La méthode consiste à prendre une boule de rayon $R \gg 1$ et à regarder toutes les possibilités d'avoir $N-k$ particules dans la boule et k à l'extérieur, pour tout $k = 0, \dots, N$.

Considérons deux fonctions $\chi, \eta \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ telles que $\chi^2 + \eta^2 = 1$, avec $\chi \equiv 1$ sur la boule de rayon 1 et $\chi \equiv 0$ en dehors de la boule de rayon 2. Nous posons $\chi_R(x) = \chi(x/R)$ et $\eta_R(x) = \eta(x/R)$. Afin de considérer toutes les possibilités, nous engendrons une partition de l'unité dans $(\mathbb{R}^d)^N$ en développant

$$1 = \prod_{j=1}^N (\chi_R(x_j)^2 + \eta_R(x_j)^2) = \sum_{k=0}^N \sum_{\substack{K \subset \{1, \dots, N\} \\ |K|=k}} \prod_{j \notin K} \chi_R(x_j)^2 \prod_{\ell \in K} \eta_R(x_\ell)^2. \quad (6.20)$$

La fonction

$$\xi_K(x_1, \dots, x_N) = \prod_{j \notin K} \chi_R(x_j) \prod_{\ell \in K} \eta_R(x_\ell)$$

localise le système dans une région de l'espace $(\mathbb{R}^d)^N$ où les k particules d'indice dans l'ensemble $K = \{j_1, \dots, j_k\} \subset \{1, \dots, N\}$ sont essentiellement en dehors de la boule, alors que celles de $\{1, \dots, N\} \setminus K$ sont essentiellement à l'intérieur.

Afin de séparer les différentes situations, nous aurons besoin de localiser l'énergie cinétique, ce qui est l'objet du lemme suivant.

Lemme 6.7 (Formule IMS). *Soit $\sum_j \chi_j^2 = 1$ une partition de l'unité dans \mathbb{R}^D , avec $\chi_j, |\nabla \chi_j| \in L^\infty(\mathbb{R}^D, \mathbb{R})$ pour tout j . Alors, pour tout $u \in H^1(\mathbb{R}^D)$, on a*

$$\int_{\mathbb{R}^D} |\nabla u(x)|^2 dx = \sum_j \int_{\mathbb{R}^D} |\nabla(\chi_j u)(x)|^2 dx - \sum_j \int_{\mathbb{R}^D} |\nabla \chi_j(x)|^2 |u(x)|^2 dx. \quad (6.21)$$

Preuve de la formule IMS (6.21). Il suffit de développer le carré $|\nabla(\chi_j u)|^2 = |\chi_j \nabla u + u \nabla \chi_j|^2$ dans l'intégrale de droite et d'utiliser que $\sum_j \chi_j \nabla \chi_j \equiv 0$, ce qui annule le terme croisé. \square

La formule (6.21), simple mais très utile pour étudier les opérateurs de Schrödinger, a été découverte par R. S. Ismagilov [Ism61], J. D. Morgan [Mor79] et B. Simon [MS80, Sim77], avant d'être popularisée plus tard par I. M. Sigal [Sig82]. L'acronyme **IMS** est dû à Barry Simon.

Considérons maintenant une suite de Weyl (Ψ_n) pour $\Sigma^V(N)$, c'est-à-dire telle que $\|\Psi_n\| = 1$, $\Psi_n \rightarrow 0$ et

$$(H^V(N) - \Sigma^V(N)) \Psi_n \rightarrow 0.$$

En particulier,

$$\mathcal{E}^V(\Psi_n) \rightarrow \Sigma^V(N)$$

et Ψ_n est bornée dans H^1 . On a donc $\Psi_n \rightarrow 0$ fortement dans L^2_{loc} par le théorème de Rellich-Kondrachov A.16, ce qui va jouer un rôle crucial dans notre argument. La formule IMS appliquée à notre partition de l'unité (6.20) dans \mathbb{R}^{dN} implique immédiatement

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^V(\Psi_n) &= \sum_{k=0}^N \sum_{\substack{K \subset \{1, \dots, N\} \\ |K|=k}} \mathcal{E}^V(\xi_K \Psi_n) - \int_{\mathbb{R}^{dN}} |\nabla \xi_K|^2 |\Psi_n|^2 \\ &\geq \sum_{k=0}^N \sum_{\substack{K \subset \{1, \dots, N\} \\ |K|=k}} \mathcal{E}^V(\xi_K \Psi_n) - \frac{C}{R^2} \end{aligned}$$

car $\|\Psi_n\|_{L^2} = 1$ et les gradients de χ_R et de η_R sont un $O(1/R)$. La fonction

$$\xi_K \Psi_n(x_1, \dots, x_N) = \Psi_n(x_1, \dots, x_N) \prod_{j \notin K} \chi_R(x_j) \prod_{\ell \in K} \eta_R(x_\ell)$$

a la symétrie appropriée lorsqu'on considère les échanges des variables dans K ou en dehors de K , mais pas les échanges de variables entre ces deux groupes. Par (anti-)symétrie de Ψ_n et de \mathcal{E}^V , on a cependant

$$\mathcal{E}^V(\xi_K \Psi_n) = \mathcal{E}^V(\xi_{\{N-k+1, \dots, N\}} \Psi_n)$$

et

$$\|\xi_K \Psi_n\|_{L^2} = \|\xi_{\{N-k+1, \dots, N\}} \Psi_n\|_{L^2}$$

et nous pouvons donc toujours supposer que $K = \{N - k + 1, \dots, N\}$ (ou $K = \emptyset$ si $k = 0$). Pour $k > 0$, nous regroupons alors les termes de l'énergie

\mathcal{E}^V comme en (6.19), ce qui fournit

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}^V(\xi_K \Psi_n) &= \int_{(\mathbb{R}^d)^k} \eta_R^{\otimes k}(X)^2 \left\langle \chi_R^{\otimes N-k} \Psi_n(\cdot, X), H^V(N-k) \chi_R^{\otimes N-k} \Psi_n(\cdot, X) \right\rangle dX \\
&\quad + \int_{(\mathbb{R}^d)^{N-k}} \chi_R^{\otimes N-k}(Y)^2 \left\langle \eta_R^{\otimes k} \Psi_n(Y, \cdot), H^0(k) \eta_R^{\otimes k} \Psi_n(Y, \cdot) \right\rangle dY \\
&\quad + \sum_{\ell=N-k+1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} V(x_\ell) \xi_K^2 |\Psi_n|^2 \\
&\quad + \sum_{j=1}^{N-k} \sum_{\ell=N-k+1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} w(x_j - x_\ell) \xi_K^2 |\Psi_n|^2. \tag{6.22}
\end{aligned}$$

En fixant les variables $X = (x_{N-k+1}, \dots, x_N)$ et en utilisant le fait que la fonction

$$Y \mapsto \prod_{j=1}^{N-k} \chi_R(y_j)^2 \Psi_n(y_1, \dots, y_{N-k}, x_{N-k+1}, \dots, x_N)$$

est (anti)symétrique pour tout $X = (x_{N-k+1}, \dots, x_N)$ fixé, nous pouvons utiliser l'inégalité $H^V(N-k) \geq E^V(N-k)$ au sens des formes quadratiques, ce qui fournit

$$\begin{aligned}
\left\langle \chi_R^{\otimes N-k} \Psi_n(\cdot, X), H^V(N-k) \chi_R^{\otimes N-k} \Psi_n(\cdot, X) \right\rangle \\
\geq E^V(N-k) \int_{(\mathbb{R}^d)^{N-k}} |\Psi(Y, X)|^2 dY.
\end{aligned}$$

La même inégalité pour l'autre terme fournit la borne inférieure

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}^V(\xi_K \Psi_n) &\geq (E^V(N-k) + E^0(k)) \|\xi_K \Psi_n\|^2 \\
&\quad + \sum_{\ell=N-k+1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} V(x_\ell) \xi_K^2 |\Psi_n|^2 \\
&\quad + \sum_{j=1}^{N-k} \sum_{\ell=N-k+1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} w(x_j - x_\ell) \xi_K^2 |\Psi_n|^2. \tag{6.23}
\end{aligned}$$

Les deux derniers termes représentent l'énergie d'interaction des particules en dehors de la boule avec le potentiel V , et celle entre les particules situées dans et hors de la boule. Comme $V \rightarrow 0$ à l'infini par hypothèse, on peut estimer directement

$$\sum_{\ell=N-k+1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} V(x_\ell) \xi_K^2 |\Psi_n|^2 \geq -k \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0, R))}.$$

Le terme d'interaction entre particules demandera un peu plus de travail et pour l'instant nous nous contentons de l'estimer par

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{N-k} \sum_{\ell=N-k+1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} w(x_j - x_\ell) \xi_K^2 |\Psi_n|^2 \\
& \geq -k(N-k) \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \chi_R(x_1)^2 \eta_R(x_2)^2 |w(x_1 - x_2)| |\Psi_n|^2 \\
& \geq -k(N-k) \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \chi_R(x_1)^2 \mathbf{1}(R \leq |x_2| \leq 3R) |w(x_1 - x_2)| |\Psi_n|^2 \\
& \quad - k(N-k) \|w\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0,R))}.
\end{aligned}$$

En conclusion, nous avons prouvé l'estimée

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}^V(\Psi_n) & \geq \mathcal{E}^V(\chi_R^{\otimes N} \Psi_n) + \min_{k=1, \dots, N} (E^V(N-k) + E^0(k)) \left(1 - \|\chi_R^{\otimes N} \Psi_n\|^2\right) \\
& \quad - C \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0,R))} - C \|w\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0,R))} \\
& \quad - C \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \chi_R(x_1)^2 \mathbf{1}(R \leq |x_2| \leq 3R) |w(x_1 - x_2)| |\Psi_n|^2 - \frac{C}{R}.
\end{aligned}$$

La constante C ne dépend que de N . Le terme $\mathcal{E}^V(\chi_R^{\otimes N} \Psi_n)$ correspond au cas où $k = 0$, c'est-à-dire $K = \emptyset$. Comme $\Psi_n \rightarrow 0$ faiblement dans $H_{a/s}^2$, elle converge fortement vers 0 dans L_{loc}^2 et ainsi $\chi_R^{\otimes N} \Psi_n \rightarrow 0$ fortement dans L^2 . Par ailleurs $\chi_R^{\otimes N} \Psi_n$ est bornée dans H^2 , donc $\chi_R^{\otimes N} \Psi_n \rightarrow 0$ fortement dans H^1 , par interpolation. Ceci démontre que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{E}^V(\chi_R^{\otimes N} \Psi_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|\chi_R^{\otimes N} \Psi_n\|^2 = 0.$$

Ainsi, en passant à la limite $n \rightarrow \infty$ à R fixé, nous avons démontré l'estimée

$$\begin{aligned}
\Sigma^V(N) & \geq \min_{k=1, \dots, N} (E^V(N-k) + E^0(k)) \\
& \quad - C \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0,R))} - C \|w\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0,R))} - \frac{C}{R} \\
& \quad - C \limsup_{n \rightarrow \infty} \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \chi_R(x_1)^2 \mathbf{1}(R \leq |x_2| \leq 3R) |w(x_1 - x_2)| |\Psi_n|^2. \quad (6.24)
\end{aligned}$$

Avant de pouvoir prendre la limite $R \rightarrow \infty$, ce qui terminera la preuve de (6.12), nous devons préciser le comportement du dernier terme.

Lemme 6.8 (Densité à k particules). *Soit $\Psi \in H_{a/s}^1((\mathbb{R}^d)^N)$ telle que $\int_{\mathbb{R}^{dN}} |\Psi|^2 = 1$. On appelle densité à k particules ou fonction de corrélation à k points la marginale*

$$\rho_\Psi^{(k)}(x_1, \dots, x_k) := \binom{N}{k} \int_{(\mathbb{R}^d)^{N-k}} |\Psi(x_1, \dots, x_k, z_{k+1}, \dots, z_N)|^2 dz_{k+1} \cdots dz_N. \quad (6.25)$$

On a

$$\sqrt{\rho_{\Psi}^{(k)}} \in H_s^1((\mathbb{R}^d)^k)$$

avec

$$\int_{(\mathbb{R}^d)^k} \rho_{\Psi}^{(k)} = \binom{N}{k} \quad \text{et} \quad \int_{(\mathbb{R}^d)^k} \left| \nabla \sqrt{\rho_{\Psi}^{(k)}} \right|^2 \leq \binom{N-1}{k-1} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbb{R}^{dN}} |\nabla_{x_j} \Psi|^2 \quad (6.26)$$

La fonction $\rho_{\Psi}^{(1)}$ est la densité totale de particules dans le système. C'est une fonction positive telle que $\int_{\mathbb{R}^d} \rho_{\Psi}^{(1)} = N$ et qui donne le nombre moyen de particules localement. Plus précisément,

$$\int_{\Omega} \rho_{\Psi}^{(1)} = \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \left(\sum_{j=1}^N \mathbb{1}_{\Omega}(x_j) \right) |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N$$

est le nombre moyen de particules dans le domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. L'interprétation de $\rho_{\Psi}^{(k)}$ est similaire. Par exemple, pour deux ensembles disjoints $\Omega, \Omega' \subset \mathbb{R}^d$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega \times \Omega'} \rho_{\Psi}^{(2)}(x, y) dx dy \\ &= \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \left(\sum_{1 \leq j < k \leq N} \mathbb{1}_{\Omega}(x_j) \mathbb{1}_{\Omega'}(x_k) \right) |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \end{aligned}$$

donne le nombre moyen de paires de particules qui sont telles que l'une est dans Ω alors que l'autre est dans Ω' .

Preuve du lemme. Comme le reste suit de la définition, nous donnons seulement la preuve de l'estimée sur le gradient dans (6.26), qui est très similaire au lemme 1.22 vu au chapitre 1. Pour cela, nous supposons que Ψ est suffisamment régulière et ne s'annule pas, afin que les calculs suivants fassent sens. Le cas général s'en déduit par densité. Nous calculons donc, avec la notation $X = (x_1, \dots, x_k)$ et $Z = (z_{k+1}, \dots, z_N)$,

$$\begin{aligned} \left| \nabla \sqrt{\rho_{\Psi}^{(k)}}(X) \right|^2 &= \frac{\left| \nabla \rho_{\Psi}^{(k)}(X) \right|^2}{4\rho_{\Psi}^{(k)}(X)} \\ &= \frac{\binom{N}{k}^2}{\rho_{\Psi}^{(k)}(X)} \left| \Re \int_{(\mathbb{R}^d)^{N-k}} \overline{\Psi(X, Z)} \nabla_X \Psi(X, Z) dZ \right|^2 \\ &\leq \frac{\binom{N}{k}^2}{\rho_{\Psi}^{(k)}(X)} \int_{(\mathbb{R}^d)^{N-k}} |\Psi(X, Z)|^2 dZ \int_{(\mathbb{R}^d)^{N-k}} |\nabla_X \Psi(X, Z)|^2 dZ \\ &= \binom{N}{k} \int_{(\mathbb{R}^d)^{N-k}} |\nabla_X \Psi(X, Z)|^2 dZ. \end{aligned}$$

En intégrant cette inégalité et en utilisant la symétrie ou l'anti-symétrie de Ψ , nous obtenons

$$\int_{(\mathbb{R}^d)^k} \left| \nabla \sqrt{\rho_{\Psi}^{(k)}} \right|^2 \leq k \binom{N}{k} \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |\nabla_{x_1} \Psi|^2 = \binom{N-1}{k-1} \sum_{j=1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |\nabla_{x_j} \Psi|^2$$

comme voulu. \square

Revenons maintenant à la preuve du théorème HVZ. De l'inégalité (6.26), nous déduisons que les $\sqrt{\rho_{\Psi_n}^{(k)}}$ sont bornés dans $H_s^1((\mathbb{R}^d)^k)$ pour tout $k = 1, \dots, N$. À extraction d'une sous-suite près, nous pouvons donc supposer que

$$\sqrt{\rho_{\Psi_n}^{(k)}} \rightharpoonup f^{(k)} \quad \text{faiblement dans } H_s^1((\mathbb{R}^d)^k).$$

Or le dernier terme de (6.24) peut s'écrire

$$\begin{aligned} & \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \chi_R(x_1)^2 \mathbb{1}(R \leq |x_2| \leq 3R) |w(x_1 - x_2)| |\Psi_n|^2 \\ &= \binom{N}{2}^{-1} \int_{(\mathbb{R}^d)^2} \chi_R(x)^2 \mathbb{1}(R \leq |y| \leq 3R) |w(x - y)| \rho_{\Psi_n}^{(2)}(x, y) dx dy. \end{aligned}$$

La convergence forte locale de $\rho_{\Psi_n}^{(2)}$ permet alors d'en déduire que

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \chi_R(x_1)^2 \mathbb{1}(R \leq |x_2| \leq 3R) |w(x_1 - x_2)| |\Psi_n|^2 \\ &= \binom{N}{2}^{-1} \int_{(\mathbb{R}^d)^2} \chi_R(x)^2 \mathbb{1}(R \leq |y| \leq 3R) |w(x - y)| f^{(2)}(x, y) dx dy, \end{aligned}$$

où $\sqrt{f^{(2)}} \in H_s^1(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, avec la même preuve qu'au lemme 1.14. En revenant à (6.24), nous obtenons donc l'inégalité

$$\begin{aligned} \Sigma^V(N) &\geq \min_{k=1, \dots, N} (E^V(N - k) + E^0(k)) \\ &\quad - C \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0, R))} - C \|w\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \setminus B(0, R))} - \frac{C}{R} \\ &\quad - C \int_{(\mathbb{R}^d)^2} \chi_R(x)^2 \mathbb{1}(R \leq |y| \leq 3R) |w(x - y)| f^{(2)}(x, y) dx dy. \end{aligned}$$

En prenant finalement $R \rightarrow \infty$, nous avons bien montré (6.12).

Étape 4 : preuve de (6.13). Lorsque $V = 0$, l'égalité (6.12) n'apporte pas grand chose puisque

$$\min_{k=1,\dots,N} (E^0(N-k) + E^0(k)) = E^0(N).$$

La preuve de la formule (6.13) est du même type que l'argument que nous avons utilisé pour (6.12), mais plus compliquée. En effet, puisqu'il n'y a pas de potentiel extérieur, il n'y a pas d'origine particulière dans le système et, au lieu d'utiliser une partition de l'unité de $(\mathbb{R}^d)^N$ basée sur le nombre de particules qui sont à l'intérieur ou à l'extérieur d'une boule fixe de rayon R , nous devons plutôt comparer les positions relatives des particules. Par exemple, nous pouvons distinguer celles qui sont dans ou à l'extérieur d'une boule de rayon R autour du centre de masse

$$X = \frac{x_1 + \dots + x_N}{N}.$$

Ceci génère une partition de l'unité faisant intervenir toutes les particules à la fois, ce qui complique grandement les calculs. Nous renvoyons donc à [RS78, Sec. XIII.5] ou à [CFKS87, Chap. 3] pour la preuve détaillée de l'égalité (6.13). \square

6.4 Particules sans interaction

Avant d'étudier plus en avant les systèmes avec interaction, il est utile de commencer par le cas beaucoup plus simple où

$$w \equiv 0,$$

que nous supposons dans toute cette section. Nous énonçons ici un résultat pour l'opérateur $-\Delta + V$ qui est en fait général et se démontre de façon similaire pour tout opérateur sous la forme

$$\sum_{j=1}^N A_j$$

sur un produit tensoriel symétrique ou anti-symétrique, dans un espace de Hilbert quelconque. Une façon de réaliser ces opérateurs est, par le théorème spectral, de considérer les opérateurs de multiplication sous la forme

$$\sum_{j=1}^N a(x_j), \quad \text{sur} \quad L^2_{a/s}(B^N, d\mu^{\otimes N}), \quad (6.27)$$

par exemple avec $B = \sigma(A) \times \mathbb{N}$ et $a(s, n) = s$. Nous laisserons en exercice l'extension du résultat suivant à ce cadre plus général.

Théorème 6.9 (Spectre de $H^V(N)$ quand $w \equiv 0$). *On suppose que V satisfait les hypothèses du théorème 6.5 et on appelle $\mu_k(-\Delta + V)$ le k ème niveau de Courant-Fischer de l'opérateur $-\Delta + V$, qui est égal à la k ème valeur propre comptée avec multiplicité ou à 0 si l'opérateur possède moins de k valeurs propres négatives. Alors on a*

$$\boxed{E_s^V(N) = N\mu_1(-\Delta + V) \quad \text{et} \quad \Sigma_s^V(N) = (N-1)\mu_1(-\Delta + V)} \quad (6.28)$$

dans le cas bosonique, et

$$\boxed{E_a^V(N) = \sum_{j=1}^N \mu_j(-\Delta + V) \quad \text{et} \quad \Sigma_a^V(N) = \sum_{j=1}^{N-1} \mu_j(-\Delta + V)} \quad (6.29)$$

dans le cas fermionique. De plus, les valeurs propres de $H^V(N)$ sont données par

$$\sigma_{\text{ponc}}(H^V(N)) = \left\{ \sum_{1 \leq j_1 \leq \dots \leq j_N} \lambda'_{j_1}(-\Delta + V) + \dots + \lambda'_{j_N}(-\Delta + V) \right\} \quad (6.30)$$

dans le cas bosonique, et

$$\sigma_{\text{ponc}}(H^V(N)) = \left\{ \sum_{1 \leq j_1 < \dots < j_N} \lambda'_{j_1}(-\Delta + V) + \dots + \lambda'_{j_N}(-\Delta + V) \right\} \quad (6.31)$$

dans le cas fermionique, où les $\lambda'_j(-\Delta + V)$ sont toutes les valeurs propres de l'opérateur $-\Delta + V$ (y compris les valeurs propres positives quand elles existent).

Nous voyons ici une différence flagrante entre les bosons et les fermions, comme représenté à la figure 6.3. L'énergie fondamentale d'un système bosonique sans interactions est obtenue en mettant toutes les particules dans le même état de plus basse énergie, c'est-à-dire en prenant

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = u_1(x_1) \cdots u_1(x_N) = (u_1)^{\otimes N}(x_1, \dots, x_N) \quad (6.32)$$

où u_1 est la première fonction propre de $-\Delta + V$, en supposant qu'elle existe (dans ce cas elle est toujours non dégénérée, par le théorème 1.20). Un tel système s'appelle un *condensat de Bose-Einstein*. À l'inverse, l'antisymétrie de Ψ implique que deux fermions ne peuvent occuper le même état, une règle que l'on appelle *principe de Pauli* en physique. Ceci force les fermions à occuper les N plus petites valeurs propres (comptées avec multiplicité). En particulier, on peut avoir $E_a^V(N) \gg E_s^V(N)$ pour N grand, en fonction du comportement des valeurs propres au voisinage de 0. Le

problème fermionique n'a pas de minimiseur si $-\Delta + V$ possède moins de N valeurs propres négatives ou nulles, alors que le problème bosonique a toujours un minimiseur si $-\Delta + V$ en a au moins une.

Notons pour finir que le spectre de $H^V(N)$ contient beaucoup de valeurs propres plongées au milieu du spectre essentiel. Si l'opérateur $-\Delta + V$ possède une infinité de valeurs propres, alors $H^V(N)$ a des valeurs propres qui ont beaucoup de points d'accumulation. Par exemple si $N = 2$, le spectre contient des valeurs propres qui s'accumulent en tous les $\mu_j(-\Delta + V)$. Ces valeurs propres plongées sont très instable et il est généralement admis qu'elles vont "génériquement" toutes disparaître lorsqu'on prend $w \neq 0$ petit.

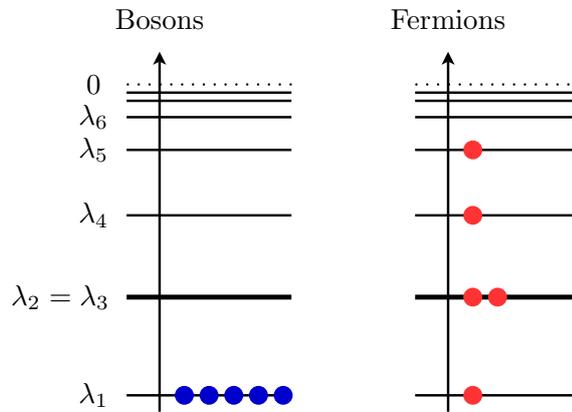


FIGURE 6.3 – Représentation graphique de la première valeur propre de l'opérateur $H^V(N)$ lorsque $w \equiv 0$, comme énoncé dans le théorème 6.9. Dans le cas bosonique, $E_s^V(N)$ est obtenue en mettant toutes les particules dans le même état, ce qui forme un condensat de Bose-Einstein. Pour les fermions, $E_a^V(N)$ est obtenue en remplissant les énergies en partant des plus basses, sans redondance (sauf en cas de multiplicité).

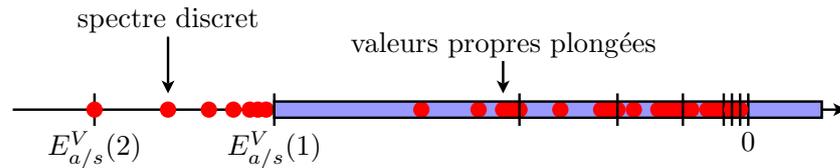


FIGURE 6.4 – Représentation graphique du spectre de l'opérateur $H^V(2)$ lorsque $w \equiv 0$, comme énoncé dans le théorème 6.9.

Démonstration du théorème 6.9. Commençons par (6.28). En prenant une fonction $\Psi = u^{\otimes N}$ où $u \in H^2(\mathbb{R}^d)$ est normalisée, on trouve que

$$E_s^V(N) \leq \langle \Psi, H^V(N)\Psi \rangle = N \left(\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2 + \int_{\mathbb{R}^d} V|u|^2 \right).$$

Par le principe de Courant-Fischer, ceci montre que

$$E_s^V(N) \leq N \inf_{\substack{u \in H^2(\mathbb{R}^d) \\ \|u\|_{L^2} = 1}} \langle u, (-\Delta + V)u \rangle = N\mu_1(-\Delta + V) = NE^V(1).$$

Réciproquement, on a par symétrie de Ψ

$$\begin{aligned} \langle \Psi, H^V(N)\Psi \rangle &= N \int_{\mathbb{R}^{dN}} (|\nabla_{x_1} \Psi|^2 + V(x_1)|\Psi|^2) \\ &= N \int_{(\mathbb{R}^d)^{N-1}} \left(\underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} (|\nabla_{x_1} \Psi|^2 + V(x_1)|\Psi|^2) dx_1}_{\geq E^V(1) \int_{\mathbb{R}^d} |\Psi(x_1, x_2, \dots)|^2 dx_1} \right) dx_2 \cdots dx_N \\ &\geq NE^V(1) \|\Psi\|^2 \end{aligned}$$

qui montre bien que $E_s^V(N) = NE^V(1)$. Le reste suit alors du théorème HVZ 6.5.

L'argument est plus difficile pour les fermions. En prenant une fonction sous la forme³

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(u_i(x_j)) := u_1 \wedge \cdots \wedge u_N(x_1, \dots, x_N)$$

où $u_1, \dots, u_N \in H^2(\mathbb{R}^d)$ forment un système orthonormé dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, un calcul fastidieux mais complètement élémentaire donne

$$\|\Psi\| = 1 \quad \text{et} \quad \langle \Psi, H^V(N)\Psi \rangle = \sum_{j=1}^N \langle u_j, (-\Delta + V)u_j \rangle.$$

En minimisant par rapport aux systèmes orthonormés u_1, \dots, u_N nous en déduisons que

$$E_a^V(N) \leq \mu_1(-\Delta + V) + \cdots + \mu_N(-\Delta + V),$$

par le théorème 5.44.

La preuve de la borne inférieure est plus difficile. Nous voulons montrer que

$$\mathcal{E}^V(\Psi) \geq \mu_1(-\Delta + V) + \cdots + \mu_N(-\Delta + V) \quad (6.33)$$

pour tout $\Psi \in H_a^1((\mathbb{R}^d)^N)$ telle que $\|\Psi\| = 1$. Soit, alors, (u_j) une base orthonormée quelconque de $L^2(\mathbb{R}^d)$, avec $u_j \in D(-\Delta + V) = H^2(\mathbb{R}^d)$ pour tout j . Les fonctions

$$(u_{j_1} \wedge \cdots \wedge u_{j_N})_{1 \leq j_1 < \cdots < j_N}$$

3. Une telle fonction s'appelle *Hartree-Fock* ou un *déterminant de Slater*

forment une base orthonormée de $L_a^2((\mathbb{R}^d)^N)$ (exercice 6.20). Nous pouvons donc montrer (6.33) pour toute combinaison linéaire finie de ces fonctions, le cas général s'en déduisant par densité. Une façon simple de tronquer la série est de se fixer un entier $K \geq 1$ et de regarder l'espace

$$\mathcal{V}_K := \text{vect}(u_{j_1} \wedge \cdots \wedge u_{j_N})_{1 \leq j_1 < \cdots < j_N \leq K},$$

qui est de dimension $\binom{K}{N}$. On peut vérifier que cet espace est inchangé si on choisit une autre base de $\text{vect}(u_1, \dots, u_K)$. Considérons alors la matrice $K \times K$ donnée par

$$M_{ij} = \langle u_i, (-\Delta + V)u_j \rangle,$$

et qui représente la projection de $-\Delta + V$ sur $\text{vect}(u_1, \dots, u_K)$. Comme M est une matrice hermitienne, elle est diagonalisable dans une base orthonormée, c'est-à-dire il existe un unitaire $U \in U(K)$ tel que

$$\langle v_i, Av_j \rangle = \langle v_i, (-\Delta + V)v_j \rangle \delta_{ij} \quad \text{avec les vecteurs} \quad v_j = \sum_{k=1}^K U_{kj} u_k.$$

Considérons donc une fonction $\Psi \in \mathcal{V}_K$ que l'on écrit sous la forme

$$\Psi = \sum_{1 \leq j_1 < \cdots < j_N \leq K} c_{j_1, \dots, j_N} v_{j_1} \wedge \cdots \wedge v_{j_N}, \quad \sum_{1 \leq j_1 < \cdots < j_N \leq K} |c_{j_1, \dots, j_N}|^2 = 1.$$

dans cette nouvelle base. Un autre calcul simple mais fastidieux montre que $H^V(N)$ projeté sur \mathcal{V}_K est diagonal dans la base qui diagonalise la projection de $-\Delta + V$, ce qui fournit

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^V(\Psi) &= \sum_{1 \leq j_1 < \cdots < j_N \leq K} |c_{j_1, \dots, j_N}|^2 \langle v_{j_1} \wedge \cdots \wedge v_{j_N}, H^V(N) v_{j_1} \wedge \cdots \wedge v_{j_N} \rangle \\ &= \sum_{1 \leq j_1 < \cdots < j_N \leq K} |c_{j_1, \dots, j_N}|^2 \sum_{k=1}^N \langle v_{j_k}, (-\Delta + V)v_{j_k} \rangle \\ &\geq (\mu_1(-\Delta + V) + \cdots + \mu_N(-\Delta + V)) \underbrace{\sum_{1 \leq j_1 < \cdots < j_N \leq K} |c_{j_1, \dots, j_N}|^2}_{=1}, \end{aligned}$$

à nouveau par le théorème 5.44 et termine la preuve de (6.29).

S'il est facile de voir que pour u_{j_1}, \dots, u_{j_N} des fonctions propres de $-\Delta + V$, $u_{j_1} \otimes_s \cdots \otimes_s u_{j_N}$ et $u_{j_1} \wedge \cdots \wedge u_{j_N}$ sont des fonctions propres de $H^V(N)$, de valeur propre $\lambda_{j_1} + \cdots + \lambda_{j_N}$, il est plus difficile de vérifier que ce sont les seules valeurs propres possibles, comme énoncé en (6.30) et (6.31). Pour cela, il est probablement plus simple d'appliquer le théorème spectral et de le montrer pour les opérateurs sous la forme (6.27). En effet, par récurrence

sur N , on a $\mu^{\otimes N}(\{s_1 + \dots + s_N = \lambda\}) > 0$ si et seulement si $\lambda = \lambda_1 + \dots + \lambda_N$ avec $\mu(\{\lambda\} \times \mathbb{N}) > 0$. C'est une conséquence de Fubini, puisque

$$\begin{aligned} & \mu^{\otimes N}(\{s_1 + \dots + s_N = \lambda\}) \\ &= \int_{(\sigma(A) \times \mathbb{N})^N} \mathbf{1}(s_1 + \dots + s_N = \lambda) d\mu(s_1, n_1) \cdots d\mu(s_N, n_N) \\ &= \int_{(\sigma(A) \times \mathbb{N})^{N-1}} \underbrace{\left(\int_{\sigma(A) \times \mathbb{N}} \mathbf{1}(s_N = \lambda - s_1 - \dots - s_{N-1}) d\mu(s_1, n_1) \right)}_{=0 \text{ sauf si } \lambda - s_1 - \dots - s_{N-1} \in \sigma(A)} \\ & \quad \times d\mu(s_2, n_2) \cdots d\mu(s_N, n_N). \end{aligned}$$

□

Exercice 6.10. *Écrire les premiers arguments de la preuve du théorème 6.9 pour un opérateur sous la forme (6.27).*

Dans le cas fermionique, la première valeur propre de $H^V(N)$ est donnée par la somme des N premières valeurs propres de $H^V(1) = -\Delta + V$. En utilisant l'inégalité de Lieb-Thirring (5.46) vue au chapitre précédent, on en déduit le résultat suivant.

Corollaire 6.11 (Lieb-Thirring pour les fermions). *On suppose que $V \in L^{d/2}(\mathbb{R}^d)$, en dimension $d \geq 1$. Alors pour tout $\Psi \in H_a^1((\mathbb{R}^d)^N)$ (fermionique), normalisée dans $L_a^2((\mathbb{R}^d)^N)$, on a*

$$\sum_{j=1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |\nabla_{x_j} \Psi|^2 + V(x_j) |\Psi|^2 \geq -C_{\text{LT}}(d) \int_{\mathbb{R}^d} V(x)_-^{1+\frac{d}{2}} dx. \quad (6.34)$$

où $C_{\text{LT}}(d) := C_{\text{LT}}(1, d)$ est la constante du théorème 5.52. De plus, on a

$$\boxed{\sum_{j=1}^N \int_{(\mathbb{R}^d)^N} |\nabla_{x_j} \Psi|^2 \geq C'_{\text{LT}}(d) \int_{\mathbb{R}^d} \rho_{\Psi}^{(1)}(x)^{1+\frac{2}{d}} dx} \quad (6.35)$$

avec

$$C'_{\text{LT}} = \frac{d}{2C_{\text{LT}}^{2/d} (1 + d/2)^{1+\frac{2}{d}}},$$

où $\rho_{\Psi}^{(1)}$ est la densité définie en (6.25).

Démonstration. L'estimée (6.34) suit immédiatement du fait que $\mathcal{E}^V(\Psi) \geq E^V(N) \geq \sum_{j=1}^{\infty} \mu_j(-\Delta + V)$ et du théorème 5.52. En prenant $V(x) = -\kappa \rho(x)^{2/d}$ et en optimisant par rapport κ , on trouve l'inégalité (6.35). □

L'inégalité (6.35) est une façon de quantifier l'influence de la contrainte d'anti-symétrie sur les fonctions d'onde. Imaginons un système complètement inclus dans un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, c'est-à-dire représenté par une fonction $\Psi \in H_0^1(\Omega^N)$. Alors $\rho_\Psi^{(1)}$ a son support dans Ω et on trouve par l'inégalité de Hölder

$$\sum_{j=1}^N \int_{\Omega^N} |\nabla_{x_j} \Psi|^2 \geq C'_{\text{LT}}(d) |\Omega|^{-\frac{2}{d}} \left(\int_{\Omega} \rho_\Psi^{(1)} \right)^{1+\frac{2}{d}} = C'_{\text{LT}}(d) |\Omega|^{-\frac{2}{d}} N^{1+\frac{2}{d}}. \quad (6.36)$$

Ainsi nous voyons que l'énergie cinétique d'un système de N fermions dans un domaine Ω doit croître au moins comme $N^{1+2/d}$. Ceci est dû au principe de Pauli qui interdit aux particules d'occuper les mêmes états, et à la croissance des valeurs propres du Laplacien de Dirichlet dans Ω comme étudié à la section 5.5. Pour les bosons, l'énergie cinétique peut être d'ordre N (par exemple pour Ψ un condensat).

Exercice 6.12. *Montrer directement l'inégalité (6.36) en utilisant des estimées sur les valeurs propres du Laplacien de Dirichlet dans un domaine Ω , supposé suffisamment régulier.*

6.5 Atomes et molécules*

Dans cette section, nous énonçons en détails certains résultats concernant le spectre du Hamiltonien $H^V(N)$ décrivant les N électrons quantiques d'une molécule comprenant par ailleurs M noyaux classiques, de charges $z_1, \dots, z_M \in]0; +\infty[$ et situés en $R_1, \dots, R_M \in \mathbb{R}^3$. Comme expliqué précédemment, ceci revient à choisir les potentiels

$$V(x) = - \sum_{m=1}^M \frac{z_m}{|x - R_m|}, \quad w(x) = \frac{1}{|x|}. \quad (6.37)$$

Tous les résultats précédents s'appliquent, puisque $V, w \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ et $V, w \rightarrow 0$ à l'infini.

Corollaire 6.13 (HVZ pour les atomes et molécules). *Pour V, w donnés par (6.37) en dimension $d = 3$, on a $\sigma_{\text{ess}}(H^V(N)) = E_{a/s}^V(N - 1)$.*

Même si les électrons sont des fermions, il est intéressant d'étudier en détails le cas bosonique, pour comprendre les différences avec le cas fermionique.⁴

4. Comme nous avons négligé le spin pour simplifier, le cas bosonique intervient aussi quand $N = 2$ si on place toute l'antisymétrie dans le spin (états singulets).

6.5.1 Existence de valeurs propres, conjecture d'ionisation

Une question importante est celle de l'existence ou de la non existence de valeurs propres sous le spectre essentiel, qui représentent des états stables du système, entre lesquels les électrons peuvent naviguer lorsqu'ils sont excités, et qui expliquent le spectre de raie observé lors d'une expérience de spectroscopie.

Intuitivement, les M noyaux ne pourront maintenir près d'eux un nombre trop important d'électrons. Si les électrons sont bien attirés par les noyaux (car le potentiel V est négatif), ils se repoussent aussi entre eux (w est positif), ce qui rend une surpopulation d'électrons défavorable d'un point de vue énergétique. Le théorème suivant fournit une description complète du nombre de valeurs propres sous $\Sigma^V(N)$ en fonction de la charge totale du système.

Théorème 6.14 (Existence ou non de valeurs propres sous $\Sigma^V(N)$). *On suppose que V et w sont donnés par (6.37) en dimension $d = 3$, avec $z_m > 0$, et on appelle*

$$Z := \sum_{m=1}^M z_m$$

la charge totale des noyaux.

- (Molécules neutres ou chargées positivement [Zhi60, ZS65]). *Si $N < Z + 1$, alors $H^N(V)$ possède une infinité de valeurs propres sous son spectre essentiel, c'est-à-dire on a*

$$\mu_k(H^V(N)) < \Sigma_{a/s}^V(N),$$

pour tout $k \geq 1$.

- (Molécules chargées négativement [Zhi71, Yaf76, VZ77, Sig82]). *Si $N \geq Z + 1$, alors $H^N(V)$ possède au plus un nombre fini de valeurs propres sous son spectre essentiel, c'est-à-dire on a*

$$\mu_k(H^V(N)) = \Sigma_{a/s}^V(N),$$

pour k assez grand.

- (Non-existence si N est grand [Rus82, Sig82, Sig84]). *Il existe un nombre critique d'électrons $N_{a/s}(V)$ tel que $H^N(V)$ ne possède aucune valeur propre sous son spectre essentiel pour tout $N > N_{a/s}(V)$, c'est-à-dire on a*

$$E_{a/s}^V(N) = E_{a/s}^V(N - 1) = \Sigma_{a/s}^V(N).$$

- (Estimée sur $N_{a/s}(V)$ [Lie84]). *On a*

$$N_{a/s}(V) < 2Z + M. \tag{6.38}$$

Le théorème précise que la charge totale du système est un bon critère pour déterminer s'il y aura une infinité ou non d'états stables : un système neutre ou chargé positivement possède toujours une infinité d'états excités, alors qu'un système chargé négativement n'en a qu'un nombre fini, voire aucun si le nombre d'électrons est trop grand. Il faut noter que si les z_m sont tous entiers (comme c'est le cas en réalité), alors la condition devient $N \leq Z$ ou $N > Z$. Toutefois, le théorème est valable lorsque les z_m sont des entiers positifs quelconques.

L'idée de la preuve de l'existence d'une infinité de valeurs propres sous $\Sigma_{a/s}^V(N)$ est assez simple et elle est très similaire à celle utilisée pour le théorème 5.45. En fait, la première partie du théorème 6.14 est valable en dimension d quelconque si on remplace $1/|x|$ par un potentiel se comportant comme $1/|x|^\alpha$ à l'infini, avec $0 < \alpha < 2$. L'argument consiste à montrer qu'il n'est pas énergétiquement favorable qu'une particule s'échappe à l'infini. Cette dernière serait soumise à un potentiel Coulombien généré par les autres particules, formant un système de charge totale $Z - (N - 1) = Z + 1 - N > 0$, donc attractif.

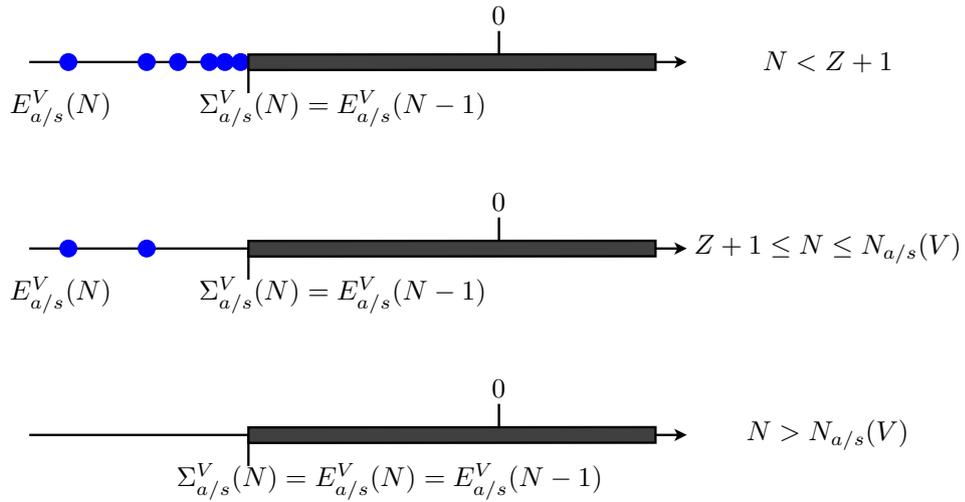


FIGURE 6.5 – Illustration des résultats du théorème 6.14.

Preuve partielle du théorème 6.14. Nous montrons seulement ici l'existence d'une infinité de valeurs propres quand $N < Z+1$, en prouvant par récurrence sur $1 \leq N < Z + 1$ que

$$\mu_k(H^V(N)) < E_{a/s}^V(N-1), \quad \forall k \geq 1.$$

Pour $N = 1$ c'est exactement le théorème 5.45. Supposons donc que $E_{a/s}^V(N-1) < E_{a/s}^V(N-2)$ et considérons le cas de N électrons. L'opérateur $H^V(N-1)$

possède une première valeur propre sous son spectre essentiel et nous appelons Ψ une fonction propre associée. Nous aurons besoin de quelques informations sur la décroissance à l'infini de Ψ . Il se trouve que Ψ décroît exponentiellement [HH77] mais ici nous n'aurons pas besoin d'une estimée si précise.

Lemme 6.15 (Estimée sur la décroissance de Ψ). *Soit Ψ une fonction propre de $H^V(N)$ sur $L^2_{a/s}((\mathbb{R}^3)^N)$, de valeur propre $\lambda < E^V_{a/s}(N-1)$. Alors*

$$\int_{(\mathbb{R}^3)^N} \mathbf{1}(|x_1| \geq R) (|\Psi|^2 + |\nabla_{x_1} \Psi|^2 + |\nabla_{x_2} \Psi|^2) = o(R^{-2})_{R \rightarrow \infty}. \quad (6.39)$$

Preuve du lemme. Soit $\eta_R(x) = \eta(x/R)$ où $\eta \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus B(0,1))$ est telle que $\eta \equiv 1$ sur $\mathbb{R}^3 \setminus B(0,2)$. Nous multiplions l'équation de Ψ par $\eta_R(x_1)^2$ et intégrons contre $\bar{\Psi}$. En utilisant par ailleurs la relation

$$-\Re \int_{\mathbb{R}^3} \eta_R^2 \bar{u} \Delta u = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla(u\eta_R)|^2 - \int_{\mathbb{R}^3} |u|^2 |\nabla \eta_R|^2 \quad (6.40)$$

similaire à la formule IMS (6.21), nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^V(\eta_R(x_1)\Psi) &= \lambda \int_{(\mathbb{R}^3)^N} \eta_R(x_1)^2 |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \\ &\quad + \int_{(\mathbb{R}^3)^N} |\nabla \eta_R(x_1)|^2 |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N. \end{aligned} \quad (6.41)$$

Maintenant nous décomposons l'énergie comme dans la preuve du théorème HVZ en isolant la variable x_1 , ce qui fait apparaître $H^V(N-1)$ dans les variables x_2, \dots, x_N . Pour ce terme nous utilisons que

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \eta_R(x_1)^2 \langle \Psi(x_1, \cdot), H^V(N-1)\Psi(x_1, \cdot) \rangle dx_1 \\ \geq E^V(N-1) \int_{(\mathbb{R}^3)^N} \eta_R(x_1)^2 |\Psi|^2. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Ensuite, nous remarquons que $\sum_{j=1}^N |x_1 - x_j|^{-1} \geq 0$, et obtenons donc

$$\begin{aligned} \int_{(\mathbb{R}^3)^N} |\nabla_{x_1} \Psi \eta_R(x_1)|^2 \\ + \int_{(\mathbb{R}^3)^N} \eta_R(x_1)^2 \left(- \sum_{m=1}^M \frac{z_m}{|x_1 - R_m|} + E^V(N-1) - \lambda \right) |\Psi|^2 \\ \leq \int_{(\mathbb{R}^3)^N} |\nabla \eta_R(x_1)|^2 |\Psi|^2 = R^{-2} \int_{(\mathbb{R}^3)^N} |\nabla \eta(x_1/R)|^2 |\Psi|^2 = o(R^{-2})_{R \rightarrow \infty}. \end{aligned}$$

Pour R assez grand, on a

$$-\sum_{m=1}^M \frac{z_m}{|x_1 - R_m|} + E^V(N-1) - \lambda \geq \frac{E^V(N-1) - \lambda}{2} > 0, \quad \forall |x_1| \geq R,$$

ce qui termine la preuve de l'estimée sur les deux premiers termes de (6.39).

Pour le terme $\eta_R(x_1)^2 |\nabla_{x_2} \Psi|^2$ il faut revenir à (6.42). Nos estimées fournissent

$$\int_{\mathbb{R}^3} \eta_R(x_1)^2 \langle \Psi(x_1, \cdot), (H^V(N-1) - E^V(N-1)) \Psi(x_1, \cdot) \rangle dx_1 = o(R^{-2})_{R \rightarrow \infty}.$$

Or on a

$$\langle \Phi, H^V(N-1)\Phi \rangle \geq \frac{1}{2} \int_{(\mathbb{R}^3)^{N-1}} |\nabla_{x_j} \Phi|^2 - C \|\Phi\|^2$$

avec nos potentiels V et w , de sorte que

$$\int_{(\mathbb{R}^3)^N} \eta_R(x_1)^2 |\nabla_{x_2} \Psi|^2 = o(R^{-2})$$

comme annoncé. \square

Puisque Ψ décroît assez vite à l'infini, nous pouvons introduire la troncature

$$\Psi_n(x_1, \dots, x_{N-1}) = \frac{\prod_{j=1}^{N-1} \chi_n(x_j) \Psi(x_1, \dots, x_{N-1})}{\left(\int_{(\mathbb{R}^3)^{N-1}} \prod_{j=1}^{N-1} \chi_n(x_j)^2 |\Psi(x_1, \dots, x_{N-1})|^2 dx_1 \cdots dx_{N-1} \right)^{\frac{1}{2}}}$$

où $\chi_n(x) = \chi(x/n)$ avec $\chi \in C_c^\infty(B_2)$ et $\chi \equiv 1$ sur B_1 . Ensuite, nous considérons un espace V quelconque de dimension k dans $C_c^\infty(B_4 \setminus B_3)$, et introduisons l'espace V_n comprenant les fonctions sous la forme

$$\Phi(x_1, \dots, x_N) := n^{-3/2} \mathcal{P}_{a/s} \Psi_n(x_1, \dots, x_{N-1}) \varphi(x_N/n)$$

où $\varphi \in V$, $\omega \in \mathbb{S}^2$ et $\mathcal{P}_{a/s}$ symétrise ou anti-symétrise la fonction obtenue comme en (6.17) et (6.18). Comme les fonctions obtenues après (anti)-symétrisation sont à support disjoint, l'énergie est finalement la même que celle de la fonction non symétrisée. Par ailleurs, la norme vaut $\|\Phi\| = \|\varphi\|$ et dans la suite nous supposons toujours que $\|\varphi\| = 1$. La fonction test Φ représente un système de $N-1$ particules dans l'état tronqué Ψ_n avec les Z noyaux, en interaction avec un électron très dilaté, placé dans la couronne $3n \leq |x| \leq 4n$ (figure 6.6), et dont l'état peut varier dans l'espace de dimension finie V .

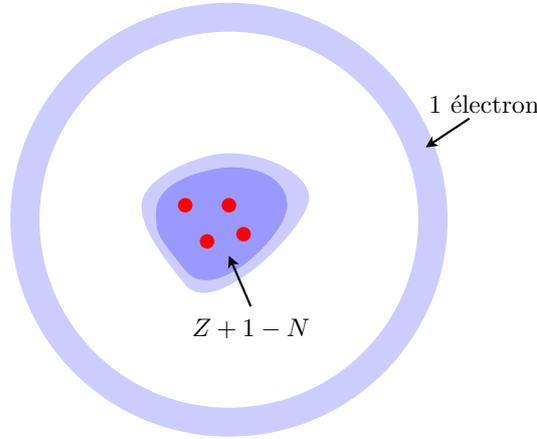


FIGURE 6.6 – État test utilisé dans la preuve du théorème 6.14.

Un calcul similaire à celui vu dans la preuve du théorème HVZ 6.5 fournit

$$\begin{aligned} \langle \Phi, H^V(N)\Phi \rangle &= \langle \Psi_n, H^V(N-1)\Psi_n \rangle + \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \varphi(x)|^2 dx \\ &\quad - \frac{1}{n} \sum_{m=1}^M z_m \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi(x)|^2}{|x - R_m/n|} dx + \frac{1}{n} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi(x)|^2 \rho_{\Psi_n}^{(1)}(y)}{|x - y/n|} dx dy \end{aligned}$$

où $\rho_{\Psi_n}^{(1)}$ est la densité associée à Ψ_n , comme vue au lemme 6.8. Puisque $\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\Psi_n}^{(1)} = N - 1$ nous obtenons pour les derniers termes

$$\begin{aligned} - \frac{1}{n} \sum_{m=1}^M z_m \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi(x)|^2}{|x - R_m/n|} dx + \frac{1}{n} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi(x)|^2 \rho_{\Psi_n}^{(1)}(y)}{|x - y/n|} dx dy \\ = \frac{-Z - 1 + N}{n} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi(x)|^2}{|x|} dx + o(n^{-1}) \end{aligned}$$

où le $o(n^{-1})$ est uniforme par rapport à $\varphi \in V$ grâce au support des fonctions considérées. Finalement, on a

$$\langle \Psi_n, H^V(N-1)\Psi_n \rangle = E_{a/s}^V(N-1) + o(n^{-2})$$

par le lemme 6.15 et on finit l'argument comme au théorème 5.45, avec le principe de Courant-Fischer. \square

Exercice 6.16. Généraliser le premier point du théorème 6.14 au cas de potentiels V et w qui se comportent comme $|x|^{-\alpha}$ à l'infini, avec $0 < \alpha < 2$.

Nous avons montré l'existence d'une infinité de valeurs propres sous $E^V(N-1)$ lorsque $N < Z + 1$. La preuve qu'il n'y a qu'un nombre fini

de valeurs propres sous $E^V(N-1)$ lorsque $N \geq Z+1$ est beaucoup plus difficile et nous ne la donnerons pas ici. Une question importante est également de déterminer à partir de quelle valeur de N la molécule devient instable, c'est-à-dire quel est le degré d'ionisation négative maximal d'une molécule. Ceci revient à estimer la constante $N_{a/s}(V)$ du théorème 6.14. Dans la nature on n'observe pas d'atomes très chargés négativement, ce qui laisse supposer que, au moins pour $M = 1$ (atomes), on devrait avoir

$$N_a(V) \leq Z + C, \quad \text{pour } M = 1, \quad (6.43)$$

où C est une constante universelle valant très probablement 1 ou 2. Cette assertion est appelée *conjecture d'ionisation* et sa preuve est encore manquante. Pour le cas des molécules, on pourrait penser que l'estimée prend la forme

$$N_a(V) \leq Z + CM, \quad \text{pour } M \geq 1.$$

Pour $M = 1$, la meilleure estimée connue à ce jour est due à Nam [Nam12] :

$$N_a(V) < 1.22Z + 3Z^{1/3}, \quad \text{pour } M = 1.$$

La plupart des travaux ont été focalisés sur l'existence ou l'absence de valeurs propres sous le spectre essentiel, car ces dernières sont aisément accessible par la méthode de Courant-Fischer. S'il est raisonnable physiquement d'imaginer que l'absence de valeurs propres sous $\Sigma_a^V(N)$ entraîne l'absence totale de valeur propre dans tout le spectre, ce fait n'est pas connu mathématiquement. En revanche, il a été prouvé dans [LL13] avec une méthode basée sur l'équation de Schrödinger dépendant du temps que $H^V(N)$ ne possède *aucune valeur propre* pour $N \geq 4Z + 1$, lorsque $M = 1$.

6.5.2 La limite $N \sim \kappa Z \rightarrow \infty$ pour les atomes

Dans cette section nous considérons le cas des atomes $M = 1$, avec $N \sim \kappa Z \rightarrow +\infty$ où $\kappa > 0$ est fixé. Pour $\kappa = 1$ ceci revient à avancer indéfiniment dans le tableau périodique. Pour comprendre l'influence du principe de Pauli, c'est-à-dire de la contrainte d'anti-symétrie sur la fonction d'onde Ψ , il est intéressant d'examiner le comportement du système si on fait l'hypothèse non physique que les électrons sont des bosons. Nous verrons alors que la conjecture d'ionisation est simplement fautive dans ce cas : les atomes "bosoniques" sont stables même quand ils sont ionisés négativement avec $\kappa > 1$. Par ailleurs, nous verrons que le système s'effondre sur lui-même. C'est donc bien le principe de Pauli qui assure la stabilité des atomes, en plus d'empêcher leur trop forte ionisation négative.

Le théorème suivant est un résumé de plusieurs travaux de recherche obtenus pendant les années 80–90. Il a été possible de démontrer que le comportement moyen des électrons d'un atome très lourd est donné par un problème non linéaire dans \mathbb{R}^3 , ce dernier étant différent pour les bosons et les fermions.

Théorème 6.17 (Atomes avec $N \sim \kappa Z \rightarrow \infty$). On prend $V(x) = -Z/|x|$ et $w(x) = 1/|x|$. Soit $\kappa \in]0; +\infty[$ fixé.

• (Bosons [BL83, Sol90, Bac91, BLLS93]). On a

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N/Z \rightarrow \kappa}} \frac{E_s^V(N)}{N^3} = \min_{\substack{u \in H^1(\mathbb{R}^3) \\ \int_{\mathbb{R}^3} |u|^2 = 1}} \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{\kappa|x|} dx \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2 |u(y)|^2}{|x-y|} dx dy \right\}. \quad (6.44)$$

Ce problème de minimisation admet une unique solution u_κ à une phase près, lorsque $\kappa \leq \kappa_c \simeq 1.21$, et aucun minimiseur pour $\kappa > \kappa_c$. La fonction u_κ est radiale décroissante et strictement positive. Pour $0 < \kappa \leq \kappa_c$, on a également, pour la densité électronique,

$$\frac{\rho_{\Psi_N}^{(1)}(x)}{N} - N^3 |u_\kappa(Nx)|^2 \rightarrow 0 \quad (6.45)$$

fortement dans $L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^3(\mathbb{R}^3)$, pour tout vecteur propre Ψ_N associé à la valeur propre $E_s^V(N)$ de $H^V(N)$. Finalement, on a

$$\boxed{\lim_{Z \rightarrow \infty} \frac{N_s(V)}{Z} = \kappa_c \simeq 1.21.} \quad (6.46)$$

• (Fermions [LS77, LSST88]). On a

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N/Z \rightarrow \kappa}} \frac{E_a^V(N)}{N^{7/3}} = \min_{\substack{\rho \in L^1 \cap L^{5/3}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^+) \\ \int_{\mathbb{R}^3} \rho = 1}} \left\{ \frac{3}{5} c_{\text{TF}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)^{5/3} dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)}{\kappa|x|} dx \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dx dy \right\} \quad (6.47)$$

où $c_{\text{TF}} = \pi^{4/3} 2^{2/3} 3^{2/3}$. Ce problème de minimisation admet une unique solution ρ_κ lorsque $\kappa \leq 1$, et aucun minimiseur pour $\kappa > 1$. La fonction ρ_κ est radiale décroissante et à support compact. Pour $0 < \kappa \leq 1$, on a également, pour la densité électronique,

$$\frac{\rho_{\Psi_N}^{(1)}(x)}{N} - N \rho_\kappa(N^{1/3}x) \rightarrow 0 \quad (6.48)$$

fortement dans $L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^{5/3}(\mathbb{R}^3)$, pour tout vecteur propre Ψ_N associé à la valeur propre $E_a^V(N)$ de $H^V(N)$. Finalement, on a

$$\boxed{\lim_{Z \rightarrow \infty} \frac{N_a(V)}{Z} = 1.} \quad (6.49)$$

Ces résultats prouvent qu'un atome fictif où les électrons seraient des bosons aurait un comportement très différent des atomes que nous connaissons.

Dans nos atomes, la densité des électrons à l'échelle $1/N^{1/3}$ est donnée par la solution du problème à droite de (6.47), qui s'appelle le modèle de Thomas-Fermi [Tho27, Fer27]. Ce problème de minimisation est non linéaire et il n'a de solution que sous l'hypothèse que $\kappa \leq 1$, où κ est la proportion limite du nombre électrons par rapport à la charge du noyau. C'est cette propriété du modèle non linéaire effectif qui permet de montrer la limite (6.49). Si c'est une indication forte que la conjecture d'ionisation est vraie, il y a cependant encore un long chemin à parcourir entre $N_a(V) = Z + o(Z)$ et $N_a(V) = Z + O(1)$.

À l'inverse, un atome 'bosonique' est bien plus concentré, à l'échelle $1/N$ et son énergie est bien plus basse (d'ordre $-N^3$) que celle des fermions (d'ordre $-N^{7/3}$). Le modèle non linéaire est stable pour un $\kappa_c > 1$ dont on peut donner l'estimation numérique $\kappa_c \simeq 1.21$. Les atomes bosoniques peuvent donc être fortement ionisés négativement, ce qui ne correspond à aucune réalité physique.

Il peut paraître étonnant que le problème très ardu de minimisation de la forme quadratique \mathcal{E}^V associée au Hamiltonien $H^V(N)$ se simplifie comme aux limites (6.49) et (6.46), et mène de plus à des problèmes non linéaires, alors que l'équation aux valeurs propres pour $H^V(N)$ est elle linéaire. C'est un phénomène très courant pour les systèmes à grand nombre de particules. Il se trouve que les deux résultats du théorème 6.17 (pour, respectivement, les bosons et les fermions) sont des cas particuliers de théorèmes plus généraux concernant des systèmes avec des potentiels V et w quelconques, qui entrent dans la classe des "*limites de champ moyen*". Dans ce régime, le système quantique est très dense et chaque particule est soumise à un grand nombre de collisions car elle a un nombre important de voisins. Un régime où toutes les particules se comportent de la même façon émerge alors à cette échelle, l'interaction étant remplacée par une "interaction moyenne", menant alors à un problème non linéaire. Les résultats les plus généraux (contenant le théorème 6.17 comme cas particulier) sur les limites de ce type dans le cas stationnaire sont [LNR14] pour les bosons et [FLS18] pour les fermions. Le lecteur pourra lire une revue des résultats les plus récents dans [Rou16, Lew15].

Nous donnons maintenant la preuve complète de la limite (6.44).

Preuve de la limite (6.44). Considérons un condensat parfait, sous la forme $\Psi(x_1, \dots, x_N) = u(x_1) \cdots u(x_N)$ avec $u \in H^2(\mathbb{R}^3)$ une fonction normalisée

dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. On trouve alors

$$\begin{aligned} \frac{E_s^V(N)}{N} &\leq \frac{\langle \Psi, H^V(N)\Psi \rangle}{N} = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - Z \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|} dx \\ &\quad + \frac{N-1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2 |u(y)|^2}{|x-y|} dx dy. \end{aligned}$$

Il est naturel de faire dépendre u de N en posant $u(x) = N^{3/2}v(Nx)$ avec v fixé, c'est-à-dire de se placer à l'échelle $1/N$ autour du noyau. Ceci fournit

$$\begin{aligned} \frac{E_s^V(N)}{N^3} &\leq \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla v(x)|^2 dx - \frac{Z}{N} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v(x)|^2}{|x|} dx \\ &\quad + \frac{N-1}{2N} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{|v(x)|^2 |v(y)|^2}{|x-y|} dx dy. \end{aligned}$$

Comme $N/Z \rightarrow \kappa$, on trouve immédiatement que

$$\begin{aligned} \limsup_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N/Z \rightarrow \kappa}} \frac{E_s^V(N)}{N^3} &\leq \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla v(x)|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v(x)|^2}{\kappa|x|} dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{|v(x)|^2 |v(y)|^2}{|x-y|} dx dy. \end{aligned}$$

Ceci fournit la borne supérieure dans (6.44), lorsqu'on minimise par rapport à v .

La borne inférieure est bien sûr plus difficile. Nous allons utiliser le résultat suivant, qui précise qu'on peut, dans une borne inférieure, remplacer l'interaction entre les N particules par une interaction moyenne, de type champ moyen, sous l'hypothèse que le potentiel est à transformée de Fourier positive.

Lemme 6.18 (Potentiel d'interaction de type positif). *Soit $\Psi \in H_{a/s}^1((\mathbb{R}^d)^N)$ et $\rho_{\Psi}^{(1)}$ sa densité définie en (6.25). Soit $f \in C^0(\mathbb{R}^d)$ une fonction paire telle que $\widehat{f} \in L^1(\mathbb{R}^d)$ et $\widehat{f} \geq 0$. Alors on a*

$$\begin{aligned} \int_{(\mathbb{R}^d)^N} \sum_{1 \leq j < k \leq N} f(x_j - x_k) |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \cdots dx_N \\ \geq \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} f(x-y) \rho_{\Psi}^{(1)}(x) \rho_{\Psi}^{(1)}(y) dx dy - \frac{f(0)N}{2}. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Preuve du lemme. Nous déduisons de l'hypothèse $0 \leq \widehat{f} \in L^1(\mathbb{R}^d)$ que, pour toute mesure signée bornée ν , nous avons

$$\iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} f(x-y) d\nu(x) d\nu(y) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{f}(k) |\widehat{\nu}(k)|^2 dk \geq 0.$$

En prenant $\nu = \sum_{j=1}^N \delta_{x_j} - g$, on trouve que pour toute fonction $g \in L^1(\mathbb{R}^d)$

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq j < k \leq N} f(x_i - x_j) &\geq -\frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} f(x-y)g(x)g(y) dx dy \\ &\quad + \sum_{j=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} f(x_j - y)g(y) dy - \frac{Nf(0)}{2}. \end{aligned}$$

Le résultat suit en intégrant contre $|\Psi|^2$ et en prenant $g = \rho_\Psi^{(1)}$. \square

Si le potentiel de Coulomb a bien une transformée de Fourier positive, elle n'est pas intégrable à l'infini, ce qui empêche d'appliquer le lemme précédent. Nous allons donc le couper aux hautes fréquences, en remarquant par exemple que

$$\sum_{1 \leq j < k \leq N} \frac{1}{|x_j - x_k|} \geq \sum_{1 \leq j < k \leq N} \frac{1 - e^{-\mu|x_j - x_k|}}{|x_j - x_k|}$$

puis en appliquant le lemme avec $f(x) = (1 - e^{-\mu|x|})/|x|$. Cette fonction est continue en 0 avec $f(0) = \mu$ et sa transformée de Fourier vaut

$$\widehat{f}(k) = \sqrt{2\pi}^{-3/2} \left(\frac{1}{|k|^2} - \frac{1}{|k|^2 + \mu^2} \right) = \sqrt{2\pi}^{-3/2} \frac{\mu^2}{|k|^2(|k|^2 + \mu^2)} \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^+)$$

(voir la preuve du lemme A.14). Ensuite, nous utilisons l'inégalité (6.26) vue précédemment au lemme 6.8, ce qui fournit pour tout Ψ

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^V(\Psi) &\geq \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \sqrt{\rho_\Psi^{(1)}}(x)|^2 dx - Z \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Psi^{(1)}(x)}{|x|} dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{1 - e^{-\mu|x-y|}}{|x-y|} \rho_\Psi^{(1)}(x) \rho_\Psi^{(1)}(y) dx dy - \frac{\mu N}{2}. \end{aligned}$$

Suite à l'argument utilisé pour la borne supérieure, il est naturel de poser $u(x) := N^{-2} \sqrt{\rho_\Psi^{(1)}}(x/N)$, qui est normalisée dans $L^2(\mathbb{R}^3)$. Nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{E}^V(\Psi)}{N^3} &\geq \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - \frac{Z}{N} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|} dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{1 - e^{-\mu N|x-y|}}{|x-y|} |u(x)|^2 |u(y)|^2 dx dy - \frac{\mu}{2N^2}. \end{aligned}$$

Par le principe de Courant-Fischer, nous en déduisons que

$$\begin{aligned} \frac{E_s^V(N)}{N^3} &\geq \inf_{\substack{u \in H^1(\mathbb{R}^3) \\ \int_{\mathbb{R}^3} |u|^2 = 1}} \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - \frac{Z}{N} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|} dx \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{1 - e^{-\mu N|x-y|}}{|x-y|} |u(x)|^2 |u(y)|^2 dx dy \right\} - \frac{\mu}{2N^2}. \end{aligned}$$

Nous avons presque démontré le résultat attendu. Il reste juste à choisir μ de sorte que le terme de droite tende vers celui de (6.44). Nous écrivons

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - \frac{Z}{N} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|} dx \\ & \quad + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{1 - e^{-\mu N|x-y|}}{|x-y|} |u(x)|^2 |u(y)|^2 dx dy \\ & \geq (1 - \varepsilon) \mathcal{E}_H(u) + \varepsilon \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{1}{\varepsilon} \left| \frac{Z}{N} - \frac{1}{\kappa} \right| \right) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|} dx \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{2\varepsilon} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{e^{-\mu N|x-y|}}{|x-y|} |u(x)|^2 |u(y)|^2 dx dy \right\} \end{aligned}$$

où \mathcal{E}_H est l'énergie apparaissant dans l'infimum à droite de (6.44). L'inégalité de Kato (1.22) vue lors de l'étude de la stabilité de l'atome d'hydrogène s'écrit

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x-R|} dx \leq \eta \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx + \frac{1}{4\eta} \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 dx, \quad \forall \eta > 0, R \in \mathbb{R}^3 \quad (6.51)$$

et elle implique que, par exemple,

$$\frac{1}{3} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - \frac{1}{\kappa} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|} dx \geq -\frac{3}{4\kappa^2} \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 dx = -\frac{3}{4\kappa^2}$$

et

$$\frac{1}{3} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - \frac{1}{\varepsilon} \left| \frac{Z}{N} - \frac{1}{\kappa} \right| \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|} dx \geq -\frac{3 \left| \frac{Z}{N} - \frac{1}{\kappa} \right|^2}{4\varepsilon^2}.$$

Comme dans la preuve de la proposition 1.2, on peut utiliser l'inégalité de Sobolev pour obtenir

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-\mu N|x-y|}}{|x-y|} |u(y)|^2 dy & \leq \int_{B(x,r)} \frac{e^{-\mu N|x-y|}}{|x-y|} |u(y)|^2 dy + \frac{e^{-\mu Nr}}{r} \\ & \leq Cr \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(y)|^2 dy + \frac{e^{-\mu Nr}}{r}, \end{aligned}$$

de sorte que

$$\frac{1}{3} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2 dx - \frac{1}{2\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{e^{-\mu N|x-y|}}{|x-y|} |u(x)|^2 |u(y)|^2 dx dy \geq -C \frac{e^{-C\mu N\varepsilon}}{\varepsilon^2}.$$

Comme $\inf \mathcal{E}_H < 0$, notre estimée finale est donc

$$\frac{E_s^V(N)}{N^3} \geq \inf_{\substack{u \in H^1(\mathbb{R}^3) \\ \int_{\mathbb{R}^3} |u|^2 = 1}} \mathcal{E}_H - C \frac{e^{-C\mu N\varepsilon}}{\varepsilon} - C\varepsilon - C \frac{\left| \frac{Z}{N} - \frac{1}{\kappa} \right|^2}{\varepsilon} - \frac{\mu}{2N^2}. \quad (6.52)$$

On peut alors prendre $\mu = N$ et $\varepsilon \rightarrow 0$ très lentement, ce qui fournit le résultat attendu.

Si on prend une suite quelconque Ψ_N normalisée telle que

$$\mathcal{E}^V(\Psi_N) = E_s^V(N) + o(N^3)$$

les estimées précédentes montrent de plus que $N^{-1}\sqrt{\rho_{\Psi_N}^{(1)}(x/N)}$ est une suite minimisante pour le problème à droite de (6.44). Lorsque $\kappa \leq \kappa_c$, ceci peut être utilisé pour montrer la convergence (6.45) de la densité vers l'unique minimiseur u_κ [BL83]. \square

La preuve dans le cas fermionique est plus difficile. On peut montrer assez rapidement que l'énergie est minorée par un terme d'ordre $-N^{7/3}$, ce qui montre déjà une grande différence avec le cas bosonique, dont l'énergie est d'ordre $-N^3$. En effet, en utilisant l'inégalité de Lieb-Thirring (6.35) et l'argument précédent pour estimer l'interaction, on trouve

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^V(\Psi) &\geq C'_{\text{LT}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\Psi}^{(1)}(x)^{\frac{5}{3}} dx - Z \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\Psi}^{(1)}(x)}{|x|} dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{1 - e^{-\mu N|x-y|}}{|x-y|} \rho_{\Psi}^{(1)}(x) \rho_{\Psi}^{(1)}(y) dx dy - \frac{\mu N}{2} \end{aligned}$$

Les termes faisant intervenir μ peuvent être contrôlés de façon similaire à précédemment (mais en faisant attention d'utiliser la norme $L^{5/3}$ de la densité au lieu du gradient de sa racine carrée). En posant $\rho(x) = N^2 \rho'(N^{1/3}x)$ on trouve alors que

$$\begin{aligned} &C'_{\text{LT}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)^{\frac{5}{3}} dx - Z \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)}{|x|} dx + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dx dy \\ &= N^{\frac{7}{3}} \left(C'_{\text{LT}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho'(x)^{\frac{5}{3}} dx - \frac{Z}{N} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho'(x)}{|x|} dx + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\rho'(x)\rho'(y)}{|x-y|} dx dy \right). \end{aligned}$$

On retrouve exactement le problème à droite de (6.47), mais avec la constante C'_{LT} à la place de $3c_{\text{TF}}/5$. Une conjecture célèbre de Lieb et Thirring [LT75] (déjà mentionnée plus haut à la section 5.5.3) énonce que $C'_{\text{LT}} = 3c_{\text{TF}}/5$, ce qui rendrait la preuve de (6.47) assez facile. Malheureusement, la conjecture n'a toujours pas été démontrée, et on doit travailler beaucoup plus pour obtenir la bonne constante $3c_{\text{TF}}/5$. Une technique usuelle pour démontrer (6.47) consiste à utiliser des *états cohérents* [LS77, Lie81]. Nous allons donner les grandes lignes d'une autre preuve, basée sur la limite semi-classique vue au théorème 5.51.

Idee de la preuve de (6.47) pour $\kappa < 1$. Nous admettons que le problème de minimisation à droite de (6.47) admet un unique minimiseur ρ_κ lorsque

$\kappa \leq 1$, et que cette fonction est solution de l'équation non linéaire suivante

$$\rho_\kappa(x) = c_{\text{TF}}^{-3/2} \left(\mu_\kappa + \frac{1}{\kappa|x|} - \rho_\kappa * \frac{1}{|x|} \right)_+^{3/2} \quad (6.53)$$

où $\mu_\kappa \leq 0$ est un multiplicateur de Lagrange provenant de la contrainte que $\int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa = 1$. Par ailleurs $\mu_\kappa < 0$ pour $\kappa < 1$ et dans ce cas ρ_κ est une fonction continue à support compact. Voir [LS77, Thm. II.20] pour la preuve de tous ces résultats.

En utilisant les idées de la preuve pour les bosons, on se ramène à étudier le problème consistant à minimiser l'énergie

$$\sum_{j=1}^N \int_{(\mathbb{R}^3)^N} |\nabla_{x_j} \Psi|^2 - Z \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Psi^{(1)}(x)}{|x|} dx + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Psi^{(1)}(x) \rho_\Psi^{(1)}(y)}{|x-y|} dx dy$$

pour tous les $\Psi \in H_a^1((\mathbb{R}^3)^N)$ normalisée dans $L_a^2((\mathbb{R}^3)^N)$. Nous pouvons introduire la fonction $\rho_{\kappa,N}(x) := N^2 \rho_\kappa(N^{1/3}x)$ dans le terme non linéaire en utilisant

$$\iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{f(x)f(y)}{|x-y|} dx dy = 4\pi \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\widehat{f}(k)|^2}{|k|^2} dk \geq 0$$

pour $f = \rho_\Psi^{(1)} - \rho_{\kappa,N}$, ce qui fournit la borne inférieure

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \int_{(\mathbb{R}^3)^N} |\nabla_{x_j} \Psi|^2 - Z \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Psi^{(1)}(x)}{|x|} dx \\ & + \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\kappa,N}(x) \rho_\Psi^{(1)}(y)}{|x-y|} dx dy - \frac{N^{7/3}}{2} \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\rho_\kappa(x) \rho_\kappa(y)}{|x-y|} dx dy. \end{aligned} \quad (6.54)$$

La somme des trois premiers termes peut se réécrire

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \int_{(\mathbb{R}^3)^N} |\nabla_{x_j} \Psi|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} \left(-\frac{Z}{|x|} + \rho_{\kappa,N} * \frac{1}{|x|} \right) \rho_\Psi^{(1)}(x) dx \\ & = \left\langle \Psi, \sum_{j=1}^N \left(-\Delta_{x_j} - \frac{Z}{|x_j|} + \rho_{\kappa,N} * \frac{1}{|x|}(x_j) - \mu_\kappa N^{4/3} \right) \Psi \right\rangle + \mu_\kappa N^{7/3} \\ & \geq \sum_{j=1}^{\infty} \mu_j \left(-\Delta - \frac{Z}{|x|} + \rho_{\kappa,N} * \frac{1}{|x|} - \mu_\kappa N^{4/3} \right) + \mu_\kappa N^{7/3} \end{aligned} \quad (6.55)$$

où à la dernière ligne nous avons utilisé le théorème 6.9. Après dilatation des distances d'un facteur $N^{2/3}$, nous voyons que l'opérateur dans la parenthèse devient

$$N^{4/3} \left(-\Delta + \tilde{V}(x/N^{1/3}) \right), \quad \text{où } \tilde{V}(x) = -\frac{1}{\kappa|x|} + \rho_\kappa * \frac{1}{|x|} - \mu_\kappa$$

(nous supposons pour simplifier que $N/Z = \kappa$). On notera que, d'après (6.53), $\tilde{V}(x)_- = c_{\text{TF}} \rho_\kappa(x)^{2/3}$, qui est une fonction continue à support compact. Par le théorème 5.51, le nombre de valeurs propres négatives de l'opérateur $-\Delta + \tilde{V}(x/N^{1/3})$ se comporte comme

$$\frac{N4\pi}{3(2\pi)^3} c_{\text{TF}}^{3/2} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa = N.$$

Ainsi, cet opérateur a juste le bon nombre de valeurs propres négatives et on peut utiliser les fonctions propres correspondantes pour trouver une borne supérieure sur $E_a^{\tilde{V}}(N)$ avec des arguments similaires à ceux présentés ici. Enfin, par le même théorème la somme des valeurs propres négatives de $-\Delta + \tilde{V}(x/N^{1/3})$ se comporte comme

$$-\frac{N8\pi}{15(2\pi)^3} c_{\text{TF}}^{5/2} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa^{5/3} = -\frac{2Nc_{\text{TF}}}{5} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa^{5/3}.$$

En utilisant l'équation de ρ_κ , on peut insérer cette information dans (6.55), ce qui fournit une borne inférieure égale à $N^{7/3}$ multiplié par

$$\begin{aligned} -\frac{2}{5} c_{\text{TF}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa^{5/3} + \mu_\kappa &= \frac{3}{5} c_{\text{TF}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa^{5/3} - c_{\text{TF}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa^{5/3} + \mu_\kappa \\ &= \frac{3}{5} c_{\text{TF}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa^{5/3} + \int_{\mathbb{R}^3} (V + \mu_\kappa) \rho_\kappa \\ &= \frac{3}{5} c_{\text{TF}} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\kappa^{5/3} - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\kappa(x)}{\kappa|x|} dx \\ &\quad + \iint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \frac{\rho_\kappa(x) \rho_\kappa(y)}{|x-y|} dx dy. \end{aligned}$$

En ajoutant le dernier terme de (6.54), on retrouve exactement le terme à droite de (6.47). \square

Exercice 6.19. *Écrire le détail de la preuve de la limite (6.47).*

Nous avons étudié le comportement d'un système de N particules dans le champ Coulombien engendré par un seul noyau très lourd, de charge proportionnelle à N et nous avons trouvé une forte différence entre les bosons et les fermions. L'énergie des atomes se comporte pour $N = Z$ grand comme $-CZ^{7/3}$, une prédiction qui fournit des résultats avec une précision étonnante si l'on prend en compte la simplicité du modèle de Thomas-Fermi. L'énergie est de l'ordre de 15 % inférieure aux prédictions d'autres modèles beaucoup plus évolués comme le modèle de Hartree-Fock [Eng88]. Divers travaux ont été consacrés à la détermination rigoureuse des termes suivants du développement en puissances de Z , ou à l'insertion d'autres effets (relativistes ou dus à la quantification du champ électromagnétique). Les termes en Z^2 et $Z^{5/3}$ sont connus explicitement, ce qui permet d'améliorer

les prédictions sur l'énergie fondamentale des atomes. Toutefois, un modèle très simple du type de celui de Thomas-Fermi ne peut expliquer la richesse du comportement des atomes du tableau périodique, puisque la chimie a plutôt lieu à l'échelle $O(1)$, ce qui correspond à des processus impliquant un nombre fini d'électrons (ceux des couches externes).

Dans cette section nous avons fourni une sélection de quelques résultats concernant un modèle à N particules très particulier (les atomes et molécules), bien sûr très important d'un point de vue en physique et en chimie. Il existe de nombreux autres systèmes quantiques qui posent des questions mathématiques intéressantes. Le lecteur intéressé à en savoir plus pourra lire par exemple [RS78, LS10, LSSY05].

Exercices complémentaires

Exercice 6.20 (Bases des espaces à N corps et gaz d'électrons libres). *On se place dans $\mathfrak{H} = L^2(C_L)$ où $C_L = (-L/2, L/2)^d$ est le cube de côté L . Dans $L^2(C_L^N)$, on introduit les notations*

$$\begin{aligned} (u_1 \otimes \cdots \otimes u_N)(x_1, \dots, x_N) &= u_1(x_1) \cdots u_N(x_N), \\ (u_1 \otimes_s \cdots \otimes_s u_N)(x_1, \dots, x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} u_{\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes u_{\sigma(N)}, \\ (u_1 \wedge \cdots \wedge u_N)(x_1, \dots, x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \varepsilon(\sigma) u_{\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes u_{\sigma(N)}, \end{aligned}$$

où $u_1, \dots, u_N \in \mathfrak{H} = L^2(C_L)$.

1. Soit $e_{L,k}(x) = L^{-d/2} e^{ik \cdot x}$ la base de Fourier, pour $k \in (2\pi/L)\mathbb{Z}^d$. Montrer que $(e_{L,k_1} \otimes \cdots \otimes e_{L,k_N})_{k_j \geq 1}$ est une base orthonormée de $L^2(C_L^N)$, que $(e_{L,k_1} \wedge \cdots \wedge e_{L,k_N})_{k_i \neq k_j}$ est une base orthonormée de l'espace fermionique $L^2_a((C_L)^N)$, et que $(e_{L,k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{L,k_N})$ est une base orthogonale de l'espace bosonique $L^2_s((C_L)^N)$. Calculer la norme de $e_{L,k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{L,k_N}$.
2. Soit $-\Delta$ le Laplacien avec conditions au bord périodiques, c'est-à-dire défini sur le domaine $H^2_{\text{per}}(C_L)$ et dont on rappelle qu'il est auto-adjoint, de spectre

$$\sigma(-\Delta) = \{|k|^2, k \in (2\pi/L)\mathbb{Z}^d\}$$

et de fonctions propres les $e_{L,k}$. Montrer que l'opérateur

$$H_N^{\min} = - \sum_{j=1}^N \Delta_{x_j}$$

est essentiellement auto-adjoint sur

$$C_{\text{per}}^\infty((C_L)^N) = \left\{ \Psi \in C^\infty((C_L)^N) : \Psi \text{ } L\text{-périodique par rapport} \right. \\ \left. \text{à chacune de ses variables quand les } N-1 \text{ autres sont fixées} \right\},$$

dans \mathfrak{H}^N . On appelle H_N sa fermeture. Étendre le résultat aux cas fermioniques et bosoniques, ce qui fournit les opérateurs $H_{N,a}$ et $H_{N,s}$. Calculer le spectre de H_N , $H_{N,a}$ et $H_{N,s}$, en particulier leur première valeur propre. Que peut-on remarquer ?

3. On étudie maintenant plus en détail le cas fermionique. On appelle $E_L(N)$ la première valeur propre de $H_{N,a}$ dans la boîte $(C_L)^N$ et on étudie son comportement à la limite $N, L \rightarrow \infty$ avec $N/L^d \rightarrow \rho \in]0, \infty[$. Le nombre ρ est la densité moyenne de particules dans la boîte C_L . Soit R un réel strictement positif et $N_R(L)$ le nombre de points du réseau $(2\pi/L)\mathbb{Z}^d$ qui sont dans la boule $B(0, R)$:

$$N_R(L) := \#\{k \in (2\pi/L)\mathbb{Z}^d \mid |k| \leq R\}.$$

Montrer que

$$\frac{|B_1|}{(2\pi)^d} (R - C/L)^d \leq \frac{N_R(L)}{L^d} \leq \frac{|B_1|}{(2\pi)^d} (R + C/L)^d$$

où $|B_1|$ est le volume de la boule unité dans \mathbb{R}^d . On choisit $R = 2\pi |B_1|^{-1/d} \rho^{1/d}$. Montrer alors que

$$\lim_{\substack{N, L \rightarrow \infty \\ NL^{-d} \rightarrow \rho}} \frac{E_L(N)}{L^d} = c_{\text{TF}} \rho^{1 + \frac{2}{d}}$$

pour une constante c_{TF} que l'on déterminera.

Annexe A

Rappels sur les espaces de Sobolev

Les espaces de Sobolev jouent un rôle essentiel dans l'analyse des équations aux dérivées partielles. Ils permettent de formuler des problèmes variationnels ou dépendant du temps dans un sens "faible" qui est cependant plus restrictif qu'au sens des distributions et est donc plus proche des solutions "fortes". Par ailleurs, comme nous avons expliqué au chapitre 2, les espaces de Sobolev apparaissent naturellement comme domaines du Laplacien, vu en tant qu'opérateur auto-adjoint, et ce sont donc des espaces incontournables en théorie spectrale.

Nous donnons ici les outils principaux sans toujours fournir les preuves et renvoyons aux livres [LL01, Eva10, Bre94, AF03, Gri85] pour plus de détails. Alors que les espaces de Sobolev sur tout l'espace \mathbb{R}^d sont des objets assez simples (grâce à l'utilisation possible de la transformée de Fourier), le cas des domaines bornés est beaucoup plus technique et difficile. La régularité de la frontière joue en effet un rôle important. Nous n'en parlerons pas beaucoup.

A.1 Définition

Soit Ω un ouvert de \mathbb{R}^d et $k \geq 1$ un entier. L'espace de Sobolev $H^k(\Omega)$ est défini par

$$H^k(\Omega) = \left\{ f \in L^2(\Omega) \text{ tels que } \partial^\alpha f \in L^2(\Omega), \text{ pour tout multi-indice } |\alpha| \leq k \right\}. \quad (\text{A.1})$$

Ici $\partial^\alpha f = \partial_{x_1}^{\alpha_1} \cdots \partial_{x_d}^{\alpha_d} f$ pour $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ est la dérivée au sens des distributions de la fonction f dans Ω , et $|\alpha| = \alpha_1 + \cdots + \alpha_d$. Dans la définition de $H^k(\Omega)$ on demande donc que toutes les dérivées de f au sens des distributions, d'ordre inférieur à k , s'identifient à des fonctions de $L^2(\Omega)$. On peut montrer que $H^k(\Omega)$ est un espace de Hilbert, muni du produit scalaire

$$\langle f, g \rangle_{H^k(\Omega)} := \sum_{|\alpha| \leq k} \langle \partial^\alpha f, \partial^\alpha g \rangle_{L^2(\Omega)}. \quad (\text{A.2})$$

L'espace de Sobolev $W^{k,p}(\Omega)$ est défini de façon similaire en remplaçant $L^2(\Omega)$ par $L^p(\Omega)$ partout. C'est alors un espace de Banach mais dans ce

cours nous utilisons presque exclusivement le cas le plus simple de l'espace de Hilbert $H^k(\Omega)$.

L'espace $H_0^k(\Omega)$ est défini comme la fermeture de $C_c^\infty(\Omega)$ pour la norme de $H^k(\Omega)$. C'est un sous-espace fermé qui est en général différent de $H^k(\Omega)$. Intuitivement, il contient les fonctions qui s'annulent au bord, alors que les fonctions de $H^k(\Omega)$ peuvent prendre n'importe quelle valeur au bord. Pour l'instant nous n'avons cependant pas encore discuté du bord de Ω . Le résultat suivant précise que $H^k(\Omega)$ est lui-même la fermeture de $C^\infty(\Omega)$ pour sa norme.

Théorème A.1 (Meyers-Serrin). *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné. Alors $C^\infty(\Omega)$ est dense dans $H^k(\Omega)$ pour la norme induite par le produit scalaire (A.2).*

La preuve du théorème est difficile lorsque Ω est quelconque, mais plus simple si Ω est suffisamment régulier.

A.2 Espaces de Sobolev sur l'intervalle $]0, 1[$

Le cas de la dimension $d = 1$ est plus facile et explicite. Pour toute fonction $f \in L^1(]0, 1[)$ dont la dérivée au sens des distributions est aussi dans $L^1(]0, 1[)$ on a pour presque tous $x, y \in]0, 1[$

$$f(x) = f(y) + \int_y^x f'(t) dt, \quad (\text{A.3})$$

et donc, en intégrant par rapport à y ,

$$f(x) = \int_0^1 f(y) dy + \int_0^1 \int_y^x f'(t) dt dy. \quad (\text{A.4})$$

La fonction à droite est continue sur $]0, 1[$ et admet des limites à gauche et à droite en 0 et en 1, respectivement. Ainsi f coïncide presque partout avec une fonction continue sur $[0, 1]$, et on a l'estimée

$$\boxed{\sup_{x \in [0, 1]} |f(x)| \leq \|f\|_{L^1(]0, 1])} + \|f'\|_{L^1(]0, 1])}. \quad (\text{A.5})$$

En d'autre terme, nous avons l'injection continue

$$W^{1,1}(]0, 1[) \hookrightarrow C^0([0, 1])$$

et en particulier l'application de restriction au bord

$$u \in W^{1,1}(]0, 1[) \mapsto (u(0^+), u(1^-)) \in \mathbb{C}^2$$

est continue.

Si $f \in L^2(]0, 1[)$ et $f' \in L^2(]0, 1[)$ alors ces fonctions sont *a fortiori* dans $L^1(]0, 1[)$ et f est donc continue sur $[0, 1]$. Mais on peut obtenir de meilleures estimées. Par exemple, on peut écrire

$$|f(x)|^2 - |f(y)|^2 = 2\Re \int_y^x \overline{f(t)} f'(t) dt.$$

Comme f et f' sont par hypothèse dans $L^2(]0, 1[)$, leur produit est bien dans $L^1(]0, 1[)$ par l'inégalité de Cauchy-Schwarz. En intégrant sur $]0, 1[$ par rapport à y , on obtient une autre relation sous la forme

$$|f(x)|^2 = 2\Re \int_0^1 \left(\int_y^x \overline{f(t)} f'(t) dt \right) dy + \int_0^1 |f(y)|^2 dy.$$

pour presque tout $x \in]0, 1[$. La fonction de droite est uniformément bornée par rapport à x , puisque

$$\int_0^1 \left(\int_y^x |\overline{f(t)} f'(t)| dt \right) dy \leq \|f\|_{L^2(]0, 1[)} \|f'\|_{L^2(]0, 1[)}. \quad (\text{A.6})$$

Donc on a prouvé l'inégalité

$$\boxed{\sup_{[0, 1]} |f|^2 \leq 2 \|f\|_{L^2(]0, 1[)} \|f'\|_{L^2(]0, 1[)} + \|f\|_{L^2(]0, 1[)}^2} \quad (\text{A.7})$$

Comparée à (A.5), la dérivée apparaît avec une puissance 1/2 quand on prend la racine carrée, ce qui peut être utile dans certaines applications. En fait, f est même Höldérienne d'exposant 1/2 puisqu'on peut écrire également, en revenant à (A.3)

$$|f(x) - f(y)| \leq \left| \int_y^x |f'(t)| dt \right| \leq |x - y|^{1/2} \|f'\|_{L^2(]0, 1[)}.$$

Ainsi, nous avons montré que les fonctions de $H^1(]0, 1[)$ sont Höldériennes d'exposant 1/2 et bornées sur $[0, 1]$.

De la même manière, les fonctions $f \in H^2(]0, 1[)$ sont de classe $C^1([0, 1])$ et leur dérivée f' est Höldérienne d'exposant 1/2. En itérant l'argument, il est possible de montrer le lemme suivant.

Lemme A.2 (Restriction au bord pour $H^k(]0, 1[)$). *Pour $k \geq 1$, on a l'injection continue*

$$H^k(]0, 1[) \subset C^{k-1}([0, 1]).$$

L'application de restriction au bord

$$f \in H^k(]0, 1[) \mapsto (f(0^+), \dots, f^{(k-1)}(0^+), f(1^-), \dots, f^{(k-1)}(1^-)) \in \mathbb{C}^{2k} \quad (\text{A.8})$$

est donc continue.

Évidemment, en prenant pour f un polynôme de degré suffisamment élevé, il est clair que l'application de restriction au bord (A.8) est aussi surjective.

Le théorème de régularité elliptique joue souvent un rôle central. Il stipule qu'il suffit de vérifier que $f \in L^2(]0, 1[)$ et que $f^{(k)} \in L^2(]0, 1[)$ pour en déduire immédiatement que $f \in H^k(]0, 1[)$. Nous l'énonçons ici avec $k = 2$ pour simplifier.

Lemme A.3 (Régularité elliptique sur $]0, 1[$). *Soit $f \in L^2(]0, 1[)$ tel que $f'' \in L^2(]0, 1[)$. Alors $f' \in C^0([0, 1])$ avec*

$$\max_{[0,1]} |f'| \leq 6\|f\|_{L^2(]0,1[)} + 2\|f''\|_{L^2(]0,1[)}. \quad (\text{A.9})$$

En particulier, $f' \in L^2(]0, 1[)$ et $f \in H^2(]0, 1[)$.

Démonstration. On sait que si la dérivée T' d'une distribution T s'identifie à une fonction $T' = g \in L^1(]0, 1[)$, alors la distribution T est en fait une fonction continue sur $[0, 1]$, qui est simplement égale à

$$T(y) = \int_0^y g(t) dt + C$$

pour une certaine constante $C = T(0^+)$. L'hypothèse que $f'' \in L^2(]0, 1[) \subset L^1(]0, 1[)$ implique que f' est une fonction continue sur $[0, 1]$, donc évidemment dans $L^2(]0, 1[)$. Du coup, f est une fonction C^1 . Pour prouver l'inégalité (A.9), nous pouvons par exemple partir de la relation

$$f'(y) = \int_0^y f''(t) dt + f'(0),$$

et intégrer contre $y(1 - y)$, ce qui fournit

$$\begin{aligned} \int_0^1 y(1 - y) \left(\int_0^y f''(t) dt \right) dy + \frac{f'(0)}{6} &= \int_0^1 y(1 - y) f'(y) dy \\ &= - \int_0^1 (1 - 2y) f(y) dy. \end{aligned}$$

En intégrant à nouveau par parties le terme de gauche, ceci peut se réécrire

$$f'(0) = -6 \int_0^1 (1 - 2y) f(y) dy + \int_0^1 (3y^2 - 2y^3 - 1) f''(y) dy.$$

Nous avons donc obtenu la formule

$$f'(y) = \int_0^y f''(t) dt - 6 \int_0^1 (1 - 2y) f(y) dy + \int_0^1 (3y^2 - 2y^3 - 1) f''(y) dy$$

à partir de laquelle l'inégalité de Cauchy-Schwarz fournit

$$\|f'\|_{L^\infty(]0,1[)} \leq 2\|f''\|_{L^1(]0,1[)} + 6\|f\|_{L^1(]0,1[)} \leq 2\|f''\|_{L^2(]0,1[)} + 6\|f\|_{L^2(]0,1[)}$$

comme nous voulions. \square

Exercice A.4 (Régularité elliptique pour $H^k(]0, 1[)$). *Énoncer et prouver un résultat similaire pour $H^k(]0, 1[)$.*

A.3 Espaces de Sobolev sur \mathbb{R}^d

Comme on a

$$\widehat{\partial^\alpha f}(p) = \prod_{j=1}^d (ip_j)^{\alpha_j} \widehat{f}(p),$$

on déduit de la formule de Parseval qu'une fonction f appartient à $H^k(\mathbb{R}^d)$ si et seulement si sa transformée de Fourier \widehat{f} est telle que $|p|^k \widehat{f}(p)$ appartient à $L^2(\mathbb{R}^d)$. Ainsi,

$$H^k(\mathbb{R}^d) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^d) : \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |p|^2)^k |\widehat{f}(p)|^2 dp < \infty \right\}. \quad (\text{A.10})$$

De plus, on voit que $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et $\Delta^k f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ impliquent immédiatement que toutes les autres dérivées d'ordre $\leq 2k$ sont également dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, qui est le théorème de régularité elliptique dans ce cadre.

La définition de $H^k(\mathbb{R}^d)$ à l'équation (A.10) s'étend immédiatement au cas où k n'est pas entier en posant

$$H^s(\mathbb{R}^d) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^d) : \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |p|^2)^s |\widehat{f}(p)|^2 dp < \infty \right\} \quad (\text{A.11})$$

pour tout $s > 0$. Alors que la norme de Sobolev s'exprime facilement en variables d'espace lorsque $s = k$ est entier, il ne semble pas évident d'écrire celle de $H^s(\mathbb{R}^d)$ en fonction de $f(x)$ lorsque s n'est pas entier. Le théorème suivant est alors utile.

Théorème A.5 (Définition de $H^s(\mathbb{R}^d)$ en variables d'espace pour $0 < s < 1$). *Soit $0 < s < 1$ et $f \in H^s(\mathbb{R})$ une fonction quelconque. Alors on a*

$$\int_{\mathbb{R}^d} |p|^{2s} |\widehat{f}(p)|^2 dp = C_{d,s} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{|f(x) - f(y)|^2}{|x - y|^{d+2s}} dx dy \quad (\text{A.12})$$

où

$$C_{d,s} = \frac{2^{2s-1} s \Gamma(s)}{\pi^{d/2} \Gamma(1-s)}.$$

Ainsi $f \in H^s(\mathbb{R}^d)$ si et seulement si l'intégrale à droite de (A.12) converge. Bien sûr, si $f \in H^s(\mathbb{R}^d)$ avec $s > 1$, on commence par écrire $s = k + \sigma$ avec $\sigma \in]0, 1[$ et on utilise la caractérisation ci-dessus pour toutes les dérivées d'ordre k de f , qui doivent appartenir à $H^\sigma(\mathbb{R}^d)$.

Démonstration. On utilise la formule intégrale suivante

$$|p|^{2s} = \frac{s}{\Gamma(1-s)} \int_0^\infty (1 - e^{-t|p|^2}) \frac{dt}{t^{1+s}}$$

qui s'obtient par un changement de variable. Notons que l'intégrale de droite converge pour $0 < s < 1$ puisque $1 - e^{-t|p|^2} = t|p|^2 + O(t^2)$ en 0, ce qui permet de réduire la singularité à t^{-s} en 0, qui est intégrable puisque $s < 1$. L'intégrabilité à l'infini suit de la condition que $s > 0$. La valeur de la constante provient de l'égalité

$$\int_0^\infty (1 - e^{-t}) \frac{dt}{t^{1+s}} = \frac{1}{s} \int_0^\infty e^{-t} \frac{dt}{t^s} = \frac{\Gamma(1-s)}{s}.$$

On obtient donc

$$\int_{\mathbb{R}^d} |p|^{2s} |\widehat{f}(p)|^2 dp = \frac{s}{\Gamma(1-s)} \int_0^\infty \left(\int_{\mathbb{R}^d} (1 - e^{-t|p|^2}) |\widehat{f}(p)|^2 dp \right) \frac{dt}{t^{1+s}}.$$

L'échange des intégrations est justifié par le fait que tout est positif. On peut aisément exprimer l'intégrale de droite en espace en utilisant la transformée de Fourier inverse de $e^{-t|p|^2}$ qui vaut $(2t)^{-d/2} e^{-\frac{|x|^2}{4t}}$, et le fait que la transformée de Fourier d'un produit est une convolution. On trouve

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} (1 - e^{-t|p|^2}) |\widehat{f}(p)|^2 dp \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 dx - (4\pi t)^{-d/2} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} \overline{f(x)} f(y) dx dy \\ &= \frac{1}{2} (4\pi t)^{-d/2} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} |f(x) - f(y)|^2 dx dy \end{aligned}$$

puisque

$$(4\pi t)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} dx = 1.$$

Nous avons donc prouvé que

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} |p|^{2s} |\widehat{f}(p)|^2 dp \\ &= (4\pi)^{-d/2} \frac{s}{2\Gamma(1-s)} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \left(\int_0^\infty e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} \frac{dt}{t^{1+s+\frac{d}{2}}} \right) |f(x) - f(y)|^2 dx dy. \end{aligned}$$

ce qui conclut la preuve puisque

$$\int_0^\infty e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} \frac{dt}{t^{1+s+\frac{d}{2}}} = \frac{1}{|x-y|^{d+2s}} \int_0^\infty e^{-\frac{1}{4t}} \frac{dt}{t^{1+s+\frac{d}{2}}} = \frac{2^{d+2s} \Gamma(s)}{|x-y|^{d+2s}}.$$

□

A.4 Trace, relèvement, prolongement

Nous avons déjà vu qu'il était possible de définir la trace au bord d'un intervalle pour une fonction $f \in H^1(]0, 1[)$, cette trace étant juste le vecteur

composé des deux valeurs $f(0)$ et $f(1)$ de la fonction continue f . En dimension supérieure, la situation est un peu plus délicate. Il est possible de définir la trace au bord, mais c'est un objet défini presque partout (dans $L^2(\partial\Omega)$) car en général f ne s'identifie pas à une fonction continue. Le théorème principal est le suivant.

Théorème A.6 (Trace). *Soit Ω un ouvert borné de \mathbb{R}^d dont la frontière est Lipschitzienne. Alors il existe une unique application continue*

$$\begin{aligned} H^1(\Omega) &\rightarrow L^2(\partial\Omega) \\ f &\mapsto f|_{\partial\Omega} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

qui coïncide avec la restriction au bord lorsque $f \in H^1(\Omega) \cap C^0(\overline{\Omega})$. De plus, on a

$$\|f\|_{L^2(\partial\Omega)}^2 \leq C \|f\|_{L^2(\Omega)} \|f\|_{H^1(\Omega)} \quad (\text{A.14})$$

où la constante C ne dépend que de Ω .

Plus généralement, si Ω est de classe $C^{k-1,1}$ (ou l'union d'un nombre fini de telles sous-variétés qui s'intersectent transversalement)¹, il existe une unique application continue

$$\begin{aligned} H^k(\Omega) &\rightarrow L^2(\partial\Omega)^k \\ f &\mapsto (f|_{\partial\Omega}, \dots, \partial_n^{k-1} f|_{\partial\Omega}) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

qui coïncide avec la restriction au bord lorsque $f \in H^k(\Omega) \cap C^k(\overline{\Omega})$, où $\partial_n = n \cdot \nabla$ désigne la dérivée dans la direction de la normale sortante n sur $\partial\Omega$, avec

$$\sum_{j=0}^{k-1} \|\partial_n^j f|_{\partial\Omega}\|_{L^2(\partial\Omega)} \leq C \|f\|_{H^{k-1}(\Omega)} \|f\|_{H^k(\Omega)}.$$

Finalement, on a $f \in H_0^k(\Omega)$ (la fermeture de $C_c^\infty(\Omega)$ dans $H^k(\Omega)$) si et seulement si $f \in H^k(\Omega)$ et toutes ses traces s'annulent :

$$f|_{\partial\Omega} = \dots = \partial_n^{k-1} f|_{\partial\Omega} = 0.$$

Pour la preuve de l'inégalité (A.14), voir par exemple [Gri85, Thm. 1.5.1.10]. L'idée est d'appliquer la formule de Green

$$2\Re \int_{\Omega} \bar{u} F \cdot \nabla u = \int_{\Omega} F \cdot \nabla |u|^2 = - \int_{\Omega} |u|^2 \operatorname{div} F + \int_{\partial\Omega} |u|^2 F \cdot n$$

pour un champ de vecteur $F \in C^1(\overline{\Omega})$ tel que $F \cdot n \geq 1$ sur $\partial\Omega$ (une régularisation de n lui même). Le fait que (A.14) fasse intervenir les deux

1. On rappelle qu'une fonction est de classe $C^{k-1,1}$ lorsque qu'elle est C^{k-1} et sa $(k-1)$ ème dérivée est Lipschitzienne. Pour un domaine Ω cela signifie que sa frontière $\partial\Omega$ est localement le graphe d'une fonction de classe $C^{k-1,1}$.

normes L^2 et H^1 est très utile. Nous l'avons déjà rencontré dans le cas de la dimension 1 à l'équation (A.7).

Il est légitime de se demander quel espace parcourt $f|_{\partial\Omega}$ lorsque f parcourt $H^k(\Omega)$, et il se trouve que ce dernier est toujours plus petit que $L^2(\partial\Omega)$ (en dimension $d \geq 2$). Dit autrement, l'application de trace (A.13) n'est pas surjective sur $L^2(\partial\Omega)$, son image est strictement incluse dans $L^2(\partial\Omega)$. Cependant, son image est dense car on peut "relever" n'importe quelle condition au bord suffisamment lisse donnée à l'avance.

Théorème A.7 (Relèvement lisse). *Si Ω est de classe $C^{k-1,1}$ et $g_j \in C^{k-1-j}(\partial\Omega)$ pour $j = 0, \dots, k-1$, alors il existe une fonction $f \in H^k(\Omega)$ telle que $\partial_n^j f|_{\Omega} = g_j$.*

Le résultat est le même si $\partial\Omega$ est l'union de plusieurs surfaces lisses, auquel cas il faut prendre les g_j à support dans les faces en question. L'idée de la construction est assez simple. On utilise d'abord des partitions de l'unité de façon à se ramener au cas où les g_j ont un petit support. Alors, sur ce support la frontière $\partial\Omega$ est presque plate. Par exemple si $k = 2$ et $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est exactement égal au demi espace $\{x_d > 0\}$ au voisinage du support de g_0 et g_1 , alors on peut simplement prendre

$$f(x_1, \dots, x_d) = \left(g_0(x_1, \dots, x_{d-1}) - x_d g_1(x_1, \dots, x_{d-1}) \right) \eta(x_1, \dots, x_d)$$

où η est une fonction C^∞ à support compact, qui localise au voisinage de la frontière. Le cas général s'en déduit par l'utilisation de cartes locales.

Il est en fait possible d'identifier précisément l'image de la restriction au bord. Par comparaison avec la formule obtenue dans tout l'espace au théorème A.5, on définit l'espace de Sobolev fractionnaire sur un domaine Ω par sa norme

$$\|f\|_{H^s(\Omega)}^2 = \iint_{\Omega \times \Omega} \frac{|f(x) - f(y)|^2}{|x - y|^{2s+2d}} dx dy$$

pour $0 < s < 1$. Si $s > 1$ on demande bien sûr que les dérivées d'ordre $[s]$ appartiennent toutes à $H^{s-[s]}$. On peut alors montrer que $\partial_n^j f|_{\partial\Omega}$ décrit tout $H^{k-j-1/2}(\partial\Omega)$ quand f décrit $H^k(\Omega)$ et que Ω est de classe $C^{k-1,1}$ (voir par exemple [Gri85, Thm 1.5.1.2]). Bien sûr, l'application ne peut pas être injective car on peut changer la fonction f à l'intérieur de Ω à sa guise sans changer ses valeurs au bord. Cependant, il est possible de construire un relèvement qui est continu pour les normes en question.

Théorème A.8 (Relèvement). *Soit Ω un ouvert de classe $C^{k-1,1}$. Il existe une application continue*

$$R : (g_0, \dots, g_{k-1}) \in \prod_{j=0}^{k-1} H^{k-j-1/2}(\partial\Omega) \mapsto f \in H^k(\Omega)$$

telle que $\partial_n^j f = g_j$ et

$$\|f\|_{H^k(\Omega)} \leq C \sum_{j=0}^{k-1} \|g_j\|_{H^{k-j-1/2}(\partial\Omega)}. \quad (\text{A.16})$$

La fonction f peut être construite de sorte qu'elle soit à support aussi proche que l'on veut du bord, mais la constante C explose lorsque la distance voulue décroît. Tel quel le théorème n'est pas vrai si Ω est l'union de faces qui sont des sous-variétés de classe $C^{k-1,1}$ car, si les fonctions g_j sont bien dans $H^{k-j-1/2}(F_i)$ pour chaque face F_i , il peut y avoir des conditions de compatibilité supplémentaires sur les arêtes, en fonction de la dimension d et de la valeur de k . Par exemple en dimension $d = 3$, les fonctions de $H^2(\Omega)$ sont toutes continues sur $\bar{\Omega}$, ce qui implique des conditions de continuité sur les arêtes pour $f|_{\partial\Omega}$, sans qu'il n'y ait aucune condition particulière pour $\partial_n f|_{\partial\Omega}$.

Il est possible d'utiliser le théorème A.8 pour étendre une fonction de $H^k(\Omega)$ en une fonction de $H^k(\mathbb{R}^d)$: on applique le résultat sur le complémentaire $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ (ou un voisinage de $\partial\Omega$ dans ce complémentaire), de sorte que les restrictions au bord de la fonction sur $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ coïncident toutes avec celles de f . En utilisant la formule de Green, on peut alors vérifier que la compatibilité de toutes les restrictions est suffisante pour que la fonction ainsi construite soit dans $H^k(\mathbb{R}^d)$.

Cependant, cette construction basée sur la continuité des traces et le prolongement hors de Ω nécessite des hypothèses fortes sur le domaine Ω , puisqu'il est nécessaire de connaître les espaces exacts dans lesquels vivent les traces de f . Il est en fait possible d'étendre une fonction de $H^k(\Omega)$ sans utiliser les traces, ce qui requiert alors une très faible régularité pour Ω (voir par exemple [Gri85, Thm 1.4.3.1]).

Théorème A.9 (Prolongement). *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné, dont la frontière est Lipschitzienne et $k \geq 1$ un entier. Alors il existe une application linéaire continue*

$$f \in H^k(\Omega) \mapsto \tilde{f} \in H^k(\mathbb{R}^d)$$

telle que $\tilde{f}\mathbf{1}_\Omega = f$ et

$$\|\tilde{f}\|_{H^k(\mathbb{R}^d)} \leq C \|f\|_{H^k(\Omega)} \quad (\text{A.17})$$

Ce résultat est très important pour pouvoir étendre facilement à un domaine borné des propriétés prouvées dans \mathbb{R}^d . Nous en verrons un exemple à la section suivante. Une fois de plus, on peut demander que l'extension soit à support aussi proche que l'on veut de la frontière de Ω , mais la constante C diverge lorsque la distance tend vers 0.

A.5 Injections de Sobolev et compacité de Rellich

Nous arrivons maintenant aux injections de Sobolev, qui précisent que les fonctions de $H^k(\Omega)$ sont en fait dans $L^p(\Omega)$ avec $p > 2$, l'injection étant compacte lorsque Ω est borné. Mais commençons plutôt par le cas de tout l'espace.

Théorème A.10 (Inégalité de Sobolev). *Soit $d \geq 1$ et $0 < s < d/2$. Il existe une constante $S_{d,s}$ telle que, pour toute fonction mesurable $f \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d) \cap \mathcal{S}'$ de sorte que l'ensemble $\{x : |f(x)| > M\}$ soit de mesure finie pour tout $M > 0$, on ait*

$$\|f\|_{L^{p^*}(\mathbb{R}^d)}^2 \leq S_{d,s} \int_{\mathbb{R}^d} |\xi|^{2s} |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi \quad (\text{A.18})$$

avec

$$p^* = \frac{2d}{d - 2s}.$$

La valeur de p^* est imposée par l'invariance des deux termes de l'inégalité sous l'action des dilatations d'espace.

Remarque A.11. *Nous avons supposé que f est une distribution tempérée pour pouvoir écrire sa transformée de Fourier. En utilisant la formule (A.12) on peut énoncer un théorème en supposant seulement $f \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$. En pratique nous avons toujours $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, ce qui implique immédiatement que $f \in \mathcal{S}'$ et que les ensembles $\{|f| > M\}$ sont de mesure finie pour tout $M > 0$. Cependant, comme l'inégalité ne fait pas intervenir la norme L^2 de f , il n'est pas très naturel d'énoncer un théorème avec cette hypothèse. Évidemment, l'inégalité (A.18) est vide si l'intégrale à droite diverge, c'est-à-dire si $|\xi|^s \widehat{f}(\xi)$ n'est pas dans $L^2(\mathbb{R}^d)$.*

Exercice A.12. *Vérifier que la puissance p^* est la seule pour laquelle les deux termes de (A.18) ont le même comportement en λ , lorsque f est remplacée par $f(\lambda x)$ pour $\lambda > 0$.*

Si $f \in H^s(\mathbb{R}^d)$ alors $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et on peut utiliser l'inégalité de Hölder, pour en déduire immédiatement que

$$f \in L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^{p^*}(\mathbb{R}^d),$$

avec l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg :

$$\begin{aligned} \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} &\leq \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^\theta \|f\|_{L^{p^*}(\mathbb{R}^d)}^{1-\theta} \leq C \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^\theta \left(\int_{\mathbb{R}^d} |\xi|^{2s} |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi \right)^{\frac{1-\theta}{2}} \\ &\leq C \left(\int_{\mathbb{R}^d} (1 + |\xi|^2)^s |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi \right)^{1/2} = C \|f\|_{H^s(\mathbb{R}^d)}, \end{aligned}$$

où

$$\frac{1}{p} = \frac{\theta}{2} + \frac{1-\theta}{p^*}.$$

Nous fournissons une preuve assez simple de l'inégalité de Sobolev (A.18) issue de [CX97].

Démonstration. Soit $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $K := \|\xi^s \widehat{f}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$. On écrit d'abord

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^{\frac{2d}{d-2s}} dx &= \frac{d-2}{d+2} \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^\infty \lambda^{\frac{2d}{d-2s}-1} \mathbb{1}(|f(x)| \geq \lambda) d\lambda dx \\ &= \frac{d-2s}{d+2s} \int_0^\infty \lambda^{\frac{2d}{d-2s}-1} |\{x : |f(x)| \geq \lambda\}| d\lambda. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Il faut maintenant estimer $|\{x : |f(x)| \geq \lambda\}|$ pour tout λ . On écrit $f = v + w$ avec $\widehat{v}(\xi) = \widehat{f}(\xi)\chi(|\xi|/a)$, où a est un paramètre dépendant de λ qui sera fixé ultérieurement et $0 \leq \chi \leq 1$ une fonction à support compact telle que $\chi|_{[0,1]} \equiv 1$ et $\chi|_{[2,\infty)} \equiv 0$. On utilise alors que

$$|\{|f(x)| \geq \lambda\}| \leq |\{|v(x)| \geq \lambda/2\}| + |\{|w(x)| \geq \lambda/2\}|$$

et on choisit a de sorte que $\|v\|_{L^\infty} \leq \lambda/2$, ce qui donne $|\{|v(x)| \geq \lambda/2\}| = 0$. En fait, on a

$$\begin{aligned} \|v\|_{L^\infty} &\leq (2\pi)^{-d} \int_{|\xi| \leq a} |\widehat{f}(\xi)| d\xi \\ &\leq (2\pi)^{-d} \left(\int_{|\xi| \leq a} \frac{d\xi}{|\xi|^{2s}} \right)^{1/2} \left(\int_{|\xi| \leq a} |\xi|^{2s} |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi \right)^{1/2} \\ &\leq CK a^{\frac{d-2s}{2}}, \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

qui suggère de prendre

$$a^{\frac{d-2s}{2}} = \lambda/(2CK) \iff a = C'(\lambda/K)^{\frac{2}{d-2s}}.$$

Il reste à estimer le terme impliquant w , pour lequel nous écrivons

$$|\{|w(x)| \geq \lambda/2\}| \leq \frac{1}{\lambda^2} \int_{\mathbb{R}^d} |w|^2 \leq \frac{1}{\lambda^2} \int_{|\xi| \geq a} |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi.$$

En insérant dans (A.19), on obtient

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^{\frac{2d}{d-2s}} dx &\leq C \int_0^\infty \lambda^{\frac{2d}{d-2s}-1} \frac{1}{\lambda^2} \int_{|\xi| \geq a} |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi d\lambda \\ &\leq C \int_0^\infty \lambda^{\frac{6s-d}{d-2s}} \int_{|\xi| \geq C'(\lambda/K)^{\frac{2}{d-2s}}} |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi d\lambda \\ &= CK^{\frac{4s}{d-2s}} \int |\xi|^{2s} |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi = CK^{\frac{2d}{d-2s}}. \end{aligned}$$

Nous avons prouvé l'inégalité pour $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$. Le cas général suit par densité mais nous n'en dirons pas plus. \square

En dimension 1 on peut utiliser la formule

$$|f(x)|^2 = 2\Re \int_{-\infty}^x \overline{f(t)} f'(t) dt$$

qui démontre que $H^1(\mathbb{R}) \hookrightarrow L^\infty(\mathbb{R})$ (en fait on a même injection dans l'espace $C_0^0(\mathbb{R})$ des fonctions continues qui tendent vers 0 à l'infini) et donc $H^1(\mathbb{R}) \hookrightarrow L^p(\mathbb{R})$ pour tout $2 \leq p \leq \infty$ par l'inégalité de Hölder. En dimension deux, on n'a pas d'injection continue dans $L^\infty(\mathbb{R}^2)$, mais par contre l'injection continue dans $L^p(\mathbb{R}^2)$ est vraie pour tout $2 \leq p < \infty$. Le théorème général est le suivant.

Théorème A.13 (Injections de Sobolev dans \mathbb{R}^d).

- Si $0 < s < d/2$, on a l'injection continue

$$H^s(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^p(\mathbb{R}^d), \quad \forall 2 \leq p \leq \frac{2d}{d-2s}. \quad (\text{A.21})$$

- Si $s = d/2$, on a

$$H^s(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^p(\mathbb{R}^d), \quad \forall 2 \leq p < \infty. \quad (\text{A.22})$$

- Si $s > d/2$, on a

$$H^s(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow C_b^{\ell, \theta}(\mathbb{R}^d) \quad (\text{A.23})$$

où ℓ est l'unique entier tel que $0 \leq \ell < s - d/2 < \ell + 1$ et $\theta = s - \ell - d/2$.

Nous voudrions insister sur le fait que les injections “sous-critiques” (c'est-à-dire par exemple pour $p < 2d/(d-2s)$ lorsque $s < d/2$) ne sont pas très difficiles. Il est bien plus difficile de montrer celle pour $p = 2d/(d-2s)$, ce que nous avons vu au théorème A.10.

Expliquons rapidement comment on peut démontrer les inégalités dans le cas sous-critique. D'après la caractérisation avec la transformée de Fourier, une fonction f appartient à $H^s(\mathbb{R}^d)$ si et seulement si elle peut s'écrire en Fourier

$$\widehat{f}(\xi) = \frac{\widehat{g}(\xi)}{(1 + |\xi|^2)^{s/2}}$$

avec $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$. De plus la norme L^2 de g est équivalente à la norme H^s de f . En variables d'espace, la formule peut s'écrire

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} h_s(x-y)g(y) dy$$

où h_s est la fonction telle que

$$\widehat{h}_s(\xi) = \frac{(2\pi)^{d/2}}{(1 + |\xi|^2)^{s/2}}.$$

Ainsi, nous sommes ramenés à prouver que si $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$, alors $h_s * g$ appartient à $L^p(\mathbb{R}^d)$ pour $2 \leq p \leq 2d/(d-2s)$ si $s < d/2$, et appartient à des espaces de fonctions plus lisses sinon. Dans le cas sous-critique, ceci suit simplement des propriétés élémentaires de la convolution, alors que dans le cas de $p = 2d/(d-2s)$, c'est l'inégalité de Hardy-Littlewood-Sobolev (5.17) qui est équivalente à l'inégalité de Sobolev [LL01].

Lemme A.14. *La fonction $h_s = (2\pi)^{d/2} \mathcal{F}^{-1}\{(1+|\xi|^2)^{-s/2}\}$ est dans $C^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{0\})$ et vérifie*

$$h_s(x) \underset{|x| \rightarrow 0}{\sim} C_{d,s} \begin{cases} \frac{1}{|x|^{d-s}} & \text{pour } s < d, \\ -\log|x| & \text{pour } s = d, \\ 1 & \text{pour } s > d. \end{cases}$$

De plus elle décroît exponentiellement à l'infini :

$$h_s(x) \leq e^{-\alpha|x|} \quad \text{pour } |x| \geq 1.$$

Démonstration. Si $s > d$ alors $\xi \mapsto (1+|\xi|^2)^{-s/2}$ appartient à $L^1(\mathbb{R}^d)$, ce qui implique immédiatement que h_s est continue et bornée. En utilisant la formule intégrale

$$\frac{1}{a^s} = \Gamma(s/2)^{-1} \int_0^\infty e^{-ta} t^{s-1} dt,$$

et la transformée de Fourier des gaussiennes, nous pouvons exprimer h_s sous la forme suivante

$$h_s(x) = \frac{2^{-d/2}}{\Gamma(s/2)} \frac{1}{|x|^{d-s}} \int_0^\infty e^{-t|x|^2 - \frac{1}{4t}} \frac{dt}{t^{1+\frac{d-s}{2}}}. \quad (\text{A.24})$$

Cette formule montre que $h_s \in C^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{0\})$ et que $h_s(x) \sim C|x|^{s-d}$ lorsque $x \rightarrow 0$, pour $s < d$. Pour $s = d$ on peut couper l'intégrale en deux, par exemple en écrivant $[0, \infty[= [0, 1] \cup]1, \infty[$ et on trouve le comportement en $-\log|x|$ pour l'intégrale sur $]1, \infty[$ en intégrant par parties.

Pour $s < d$, en utilisant que $e^{-\frac{1}{4t}} \leq 1$ on obtient $h_s(x) \leq C(d, s)|x|^{s-d}$ et donc h_s est bornée à l'infini. De façon similaire on peut prouver que $h_s(x) \leq |\log|x|| + C$ si $s = d$. Pour trouver une meilleure estimée à l'infini on peut poser $t = u/|x|$ et on trouve

$$h_s(x) = \frac{2^{-d/2} c(s)}{|x|^{\frac{d-s}{2}}} \int_0^\infty e^{-(u+\frac{1}{4u})|x|} \frac{du}{u^{1+\frac{d-s}{2}}}.$$

Comme $u + 1/(4u) \geq 2\sqrt{u/4u} = \sqrt{2}$, on obtient par exemple

$$h_s(x) \leq 2^{\frac{s-d}{2}} e^{-|x|/\sqrt{2}} h_s(x/2)$$

qui montre la décroissance exponentielle. \square

On déduit du lemme que

$$h_s \in \begin{cases} L^p(\mathbb{R}^d), & 1 \leq p < \frac{d}{d-s}, & \text{pour } s < d, \\ L^p(\mathbb{R}^d), & 1 \leq p < \infty, & \text{pour } s = d, \\ L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d), & & \text{pour } s > d. \end{cases} \quad (\text{A.25})$$

Il reste alors à utiliser l'inégalité de Young

$$\|f * g\|_{L^r(\mathbb{R}^d)} \leq \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|g\|_{L^q(\mathbb{R}^d)}, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 + \frac{1}{r}, \quad (\text{A.26})$$

pour conclure la preuve du théorème A.13 dans les cas sous-critiques. Pour obtenir le caractère $C_b^\ell(\mathbb{R}^d)$ lorsque $s = \ell + \sigma > d$ il faut commencer par prendre ℓ dérivées, ce qui revient à multiplier $(1+|\xi|^2)^{-s/2}$ par $|\xi|^\ell$ en Fourier et appliquer ce qui précède à $h_{s-\ell}$.

Si Ω est un ouvert borné, on peut utiliser le théorème A.9 qui permet d'étendre toute fonction de $H^s(\Omega)$ dans \mathbb{R}^d et on en déduit immédiatement un résultat similaire au théorème A.13.

Théorème A.15 (Injections de Sobolev dans Ω). *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné dont la frontière est Lipschitzienne et k un entier.*

- Si $2k < d$, on a l'injection continue

$$H^k(\Omega) \hookrightarrow L^{\frac{2d}{d-2k}}(\Omega).$$

- Si $2k = d$, on a

$$H^k(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega), \quad \forall 2 \leq p < \infty.$$

- Si $2k > d$, on a

$$H^k(\Omega) \hookrightarrow C_b^{\ell, \theta}(\overline{\Omega})$$

où ℓ est l'unique entier tel que $0 \leq \ell < k - d/2 < \ell + 1$ et $\theta = k - \ell - d/2$.

Dans le cas d'un ouvert borné, l'injection est en fait compacte, ce qui est une information importante pour passer à la limite forte localement lorsqu'on a une suite qui converge faiblement dans un espace de Sobolev.

Théorème A.16 (Rellich-Kondrachov). *Pour tout ouvert borné Ω , l'injection*

$$H^s(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^2(\Omega)$$

est compacte pour tout $s > 0$.

Par l'inégalité de Hölder, on déduit immédiatement que les injections

$$H^s(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow L^p(\Omega)$$

sont compactes pour $2 \leq p < 2d/(d - 2s)$ lorsque $0 < s < d/2$ et pour $2 \leq p < \infty$ dans les autres cas. De la même façon, on a des injections compactes

$$H^k(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$$

lorsque Ω est borné et k est entier.

Nous donnons maintenant la preuve du théorème A.16.

Démonstration. Soit Ω un ouvert borné et (f_n) une suite de fonctions de $H^s(\mathbb{R}^d)$, qui converge faiblement vers $f \in H^s(\mathbb{R}^d)$, $f_n \rightharpoonup f$. On doit montrer que $\mathbf{1}_\Omega f_n \rightarrow \mathbf{1}_\Omega f$ fortement dans $L^2(\Omega)$. D'après la discussion suivant le théorème A.13, on peut écrire $f_n = h_s * g_n$ où (g_n) est une suite bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. On a en fait $g_n \rightharpoonup g$ faiblement dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ où $\widehat{g}(\xi) = (1 + |\xi|^2)^{s/2} \widehat{f}(\xi)$. Nous devons donc finalement montrer que si $g_n \rightharpoonup g$ faiblement dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, alors $\mathbf{1}_\Omega(h_s * g_n) \rightarrow \mathbf{1}_\Omega(h_s * g)$ fortement dans $L^2(\Omega)$. Une autre façon d'énoncer ce résultat est de dire que l'opérateur $g \mapsto \mathbf{1}_\Omega h_s * g$ est compact sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. Le résultat est bien plus général et suit immédiatement du lemme suivant puisque $h_s \in L^1(\mathbb{R}^d)$ d'après le lemme A.14.

Lemme A.17. Soient $F \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ avec $F \rightarrow 0$ à l'infini, et $G \in L^1(\mathbb{R}^d)$. Alors l'opérateur $K_{F,G} : g \mapsto (G * g)F$ est compact sur $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Preuve du lemme. Par l'inégalité de Young on a $\|G * g\|_{L^2} \leq \|G\|_{L^1} \|g\|_{L^2}$. Ainsi $\|K_{F,G}g\|_{L^2} \leq \|F\|_{L^\infty} \|G\|_{L^1} \|g\|_{L^2}$, ce qui signifie que $K_{F,G}$ est contrôlé en norme d'opérateur par $\|K_{F,G}\| \leq \|F\|_{L^\infty} \|G\|_{L^1}$. Si on a des suites $F_n \rightarrow F$ dans L^∞ et $G_n \rightarrow G$ dans L^1 , on déduit par le même type d'inégalité que $\|K_{F_n, G_n} - K_{F,G}\| \rightarrow 0$ en norme d'opérateur. Or on sait qu'une limite en norme d'une suite d'opérateurs compacts est toujours compacte. Nous en déduisons donc qu'il suffit de prouver le lemme pour $F, G \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ (on rappelle que toute fonction de L^∞ qui tend vers 0 à l'infini peut être approchée par des suites dans C_c^∞ mais que ceci est bien sûr faux dans tout L^∞). Or

$$\int_{\mathbb{R}^d} G(x-y)g_n(y) dy \rightarrow \int_{\mathbb{R}^d} G(x-y)g(y) dy$$

pour presque tout x par la définition de la convergence faible $g_n \rightharpoonup g$, sous la seule condition que $G \in L^2$. Par ailleurs $\|G * g_n\|_{L^\infty} \leq \|G\|_{L^2} \|g_n\|_{L^2}$ par l'inégalité de Cauchy-Schwarz et ainsi $|(G * g_n)F| \leq C|F|$. Par le théorème de convergence dominée, on en déduit que $(G * g_n)F \rightarrow (G * g)F$ fortement dans L^2 . \square

Ceci termine la preuve du théorème de Rellich-Kondrachov. \square

Pour un résultat plus général du même type que le lemme A.17, voir le théorème 5.17.

A.6 Régularité elliptique sur un domaine borné*

Nous avons déjà mentionné le théorème de régularité elliptique sur $\Omega =]0, 1[$ et sur $\Omega = \mathbb{R}^d$, qui stipule que $f \in L^2(\Omega)$ et $\Delta f \in L^2(\Omega)$ impliquent $f \in H^2(\Omega)$. Ce résultat joue un rôle important lorsqu'on cherche à identifier le domaine de l'adjoint du Laplacien ou de ses perturbations, comme nous l'avons rencontré plusieurs fois dans le cours. Nous voulons discuter ici rapidement du théorème de régularité elliptique sur un domaine borné Ω , qui se trouve être beaucoup plus difficile. En fait, il est *faux* que $f, \Delta f \in L^2(\Omega)$ implique toujours $f \in H^2(\Omega)$ sur un domaine Ω non égal à tout \mathbb{R}^d en dimension $d \geq 2$.

Par exemple, on rappelle que la fonction $f(x) = |x - x_0|^{-1}$ vérifie $-\Delta f = 4\pi\delta_{x_0}$ en dimension $d = 3$. Si $\Omega \neq \mathbb{R}^3$ on peut alors placer x_0 sur la frontière $\partial\Omega$, de sorte que l'on trouve $\Delta f = 0$ au sens des distributions dans Ω (cette notion utilise les fonctions $C_c^\infty(\Omega)$ qui s'annulent au bord et ne voient pas la mesure singulière δ_{x_0}). Ainsi, $\Delta f \in L^2(\Omega)$. Par ailleurs, on a

$$\int_{\Omega} |f(x)|^2 dx = \int_{\Omega} \frac{dx}{|x - x_0|^2} < \infty$$

si Ω est borné, car la fonction $1/|x|$ est de carré intégrable au voisinage de l'origine en dimension $d = 3$. Mais

$$\nabla f(x) = -\frac{x - x_0}{|x - x_0|^3}$$

n'est pas de carré intégrable au voisinage de x_0 . Il suffit alors que Ω contienne un ensemble $A \subset \Omega$ assez gros, tel que $x_0 \in \overline{A}$, avec la propriété que

$$\int_A |\nabla f(x)|^2 dx = \int_A \frac{dx}{|x - x_0|^4} = +\infty$$

et on en déduit que l'on n'a même pas $f \in H^1(\Omega)$. L'intégrale diverge si A est par exemple un cône de pointe x_0 et d'angle positif et il suffit donc de pouvoir placer un tel cône en au moins un point de la frontière (ce qui est faisable pour tous les ouverts réguliers) pour en déduire que le théorème de régularité elliptique ne peut pas être vrai. Cet exemple (généralisable par le même argument en toute dimension $d \geq 2$) montre qu'il est impératif d'avoir des informations sur la valeur de f au bord, afin de pouvoir en déduire que $f \in H^2(\Omega)$. Ceci complique grandement l'étude, puisque qu'il faut donc commencer par donner un sens à la restriction de f au bord, avec les seules informations que $f, \Delta f \in L^2(\Omega)$.

Il se trouve que tout $f \in L^2(\Omega)$ tel que $\Delta f \in L^2(\Omega)$ a des restrictions au bord bien définies, mais qui sont des distributions. Par exemple, si Ω est suffisamment lisse, alors $f|_{\partial\Omega}$ appartient à l'espace $H^{-1/2}(\partial\Omega)$ qui est par définition le dual de $H^{1/2}(\partial\Omega)$ (l'image de l'application de restriction

au bord). De même, $\partial_n f|_{\partial\Omega}$ appartient à l'espace $H^{-3/2}(\partial\Omega)$. Ces assertions peuvent être démontrées en se basant sur la formule de Green qui, du coup, fait sens dans ces espaces

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} g(-\Delta \bar{f}) - \int_{\Omega} \bar{f}(-\Delta g) \\ = {}_{H^{-1/2}(\partial\Omega)}\langle f, \partial_n g \rangle_{H^{1/2}(\partial\Omega)} - {}_{H^{-3/2}(\partial\Omega)}\langle \partial_n f, g \rangle_{H^{3/2}(\partial\Omega)}, \\ \forall g \in H^2(\Omega), \forall f \in L^2(\Omega) \text{ tel que } \Delta f \in L^2(\Omega), \quad (\text{A.27}) \end{aligned}$$

voir [LM68]. Mentionnons que la situation est encore plus complexe lorsque la frontière de Ω est composée d'une union de surfaces lisses, qui s'intersectent transversalement (par exemple Ω un polygone en dimension $d = 2$!). Les propriétés sont les mêmes sur chacune des surfaces en question, mais il y a en plus des conditions de compatibilité sur les arêtes [LM68, Gri85]. Les distributions sont par contre complètement déterminées par leur restriction à chaque face, elles ne peuvent pas vivre uniquement sur les arêtes.

Le théorème suivant fournit la régularité elliptique voulue pour la condition au bord de Robin, qui demande que la dérivée normale $\partial_n f|_{\partial\Omega}$ au bord soit proportionnelle à la restriction au bord $f|_{\partial\Omega}$.

Théorème A.18 (Régularité elliptique). *Soit Ω un ouvert borné tel que*

- soit $\partial\Omega$ forme une variété de co-dimension 1 de classe C^2 ;
- soit $\partial\Omega$ est l'union d'un nombre fini de telles hypersurfaces, et Ω est strictement convexe au voisinage des divers singularités du bord.

Soit également $0 \leq \theta < 1$. Alors, il existe une constante $C(\Omega, \theta)$ (ne dépendant que de Ω et de θ) telle que pour toute fonction $f \in H^2(\Omega)$ satisfaisant

$$\cos(\pi\theta) f|_{\partial\Omega} + \sin(\pi\theta) \partial_n f|_{\partial\Omega} = 0, \quad (\text{A.28})$$

on a l'estimée

$$\|f\|_{H^2(\Omega)} \leq C(\Omega, \theta) \left(\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta f\|_{L^2(\Omega)} \right). \quad (\text{A.29})$$

Par ailleurs, si $f \in L^2(\Omega)$ est telle que $\Delta f \in L^2(\Omega)$ et satisfait la condition de Robin (A.28) au sens des distributions sur $\partial\Omega$, alors $f \in H^2(\Omega)$ et satisfait l'inégalité (A.29).

Ce théorème précise que l'information que $f, \Delta f \in L^2(\Omega)$, alliée à la condition au bord au sens des distributions, suffit à assurer que $f \in H^2(\Omega)$, c'est-à-dire à contrôler toutes les autres dérivées $\partial_{x_i} f$ et $\partial_{x_i} \partial_{x_j} f$ avec $i \neq j$. En dimension 1, les conditions au bord ne sont pas utiles (lemme A.3 vu précédemment) et elles ne deviennent indispensables qu'en dimension supérieure. La condition de Robin contient celle de Dirichlet ($\theta = 0$) et de Neumann ($\theta = 1/2$) qui sont les deux plus fréquemment rencontrées dans

la pratique. Il y a de nombreuses autres conditions au bord que celle de Robin pour lesquelles le théorème est vrai, mais nous n'en parlons pas ici et renvoyons le lecteur intéressé à [LM68].

La preuve du théorème A.18 est longue et technique. Elle est généralement divisée en deux étapes, la première consistant à obtenir des estimées sur les dérivées à l'intérieur de Ω (la condition au bord ne joue alors aucun rôle), et la seconde, plus difficile, dédiée à la régularité à la frontière. Dans la plupart des ouvrages sur le sujet, la seconde partie du théorème est par ailleurs énoncée pour la condition de Dirichlet, avec l'hypothèse supplémentaire que $f \in H_0^1(\Omega)$ (voir par exemple [Bre94, Thm. IX.25]). La preuve complète du théorème A.18 peut être trouvée dans [LM68].

Nous avons supposé que Ω est borné pour simplifier, mais le résultat reste vrai lorsque Ω n'est pas borné, à condition que la frontière vérifie des estimées uniformes à l'infini. Par ailleurs, insistons sur la nouvelle hypothèse que Ω est strictement convexe au voisinage des singularités du bord. Cette condition est nécessaire pour que le Laplacien soit auto-adjoint sur un sous-espace de $H^2(\Omega)$. Si Ω n'est pas strictement convexe au voisinage des coins de Ω , il est encore possible de définir le Laplacien de Robin $-\Delta_{R,\theta}$ en utilisant la méthode de Friedrichs de la section 3.2 mais son domaine n'est pas inclus dans $H^2(\Omega)$. Voir la discussion de la section 3.3.4.

Exercices complémentaires

Exercice A.19 (Espaces de Sobolev et séries de Fourier sur l'intervalle $]0, 1[$). Pour $f \in L^2(]0, 1[)$ on appelle $c_n(f) = \int_0^1 f(t)e^{-2i\pi nt} dt$ son n ième coefficient de Fourier. On rappelle que $(e^{2i\pi nt})_{n \in \mathbb{Z}}$ forme une base orthonormée de $L^2(]0, 1[)$.

1. Calculer $c_n(f)$ pour $f(x) = x$. Si $f \in H^1(]0, 1[)$, la somme $\sum_{n \in \mathbb{Z}} n^2 |c_n(f)|^2$ est-elle toujours finie ?

2. On appelle

$$H_{\text{per}}^1(]0, 1[) = \left\{ f \in H^1(]0, 1[) : \sum_{n \in \mathbb{Z}} n^2 |c_n(f)|^2 < \infty \right\}.$$

Donner une caractérisation de cet espace en fonction des valeurs au bord $f(0)$ et $f(1)$.

On rappelle que $(\cos(\pi nt))_{n \geq 0}$ et $(\sin(\pi nt))_{n \geq 1}$ forment deux bases orthonormées de $L^2(]0, 1[)$. Penser en effet à l'application

$$f \in L^2(]0, 1[) \mapsto f(x)\mathbb{1}_{]0, 1[}(x) \pm f(-x)\mathbb{1}_{]-1, 0[}(x) \in L^2(]-1, 1[)$$

définie par parité ou imparité. On appelle

$$d_n^+(f) = \int_0^1 \cos(\pi nt) f(t) dt, \quad d_n^-(f) = \int_0^1 \sin(\pi nt) f(t) dt$$

les coefficients de Fourier correspondants.

3. Montrer que

$$H^1(]0, 1[) = \left\{ f \in L^2(]0, 1[) : \sum_{n \geq 0} n^2 |d_n^+(f)|^2 < \infty \right\}.$$

4. Calculer $d_n^\pm(f)$ pour $f(x) = x$ et en déduire que ce résultat ne se généralise pas à $d_n^-(f)$ ou à $H^k(]0, 1[)$ pour $k \geq 2$.

Annexe B

Problèmes

B.1 Le potentiel delta

L'objectif de ce problème est de définir et d'étudier l'opérateur

$$\boxed{H_\alpha := -\Delta + \alpha\delta_0.} \quad (\text{B.1})$$

où δ_0 est la delta de Dirac. Cet opérateur doit coïncider avec le Laplacien

$$H^{\min} := -\Delta, \quad \text{sur} \quad D(H^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{0\}).$$

Il faut donc déterminer quelle extension auto-adjointe de H^{\min} représente H_α , si elle existe. Pour $\alpha = 0$, nous obtiendrons juste

$$H_0 = -\Delta, \quad \text{sur} \quad D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^d),$$

le Laplacien usuel, qui est auto-adjoint et dont le spectre vaut $[0; +\infty[$. Nous montrerons que H_α est bien défini en dimension $d = 1$ pour tout $\alpha \in \mathbb{R}$ et, avec plus de travail, en dimensions $d \in \{2, 3\}$ pour $\alpha < 0$. Par contre, H_α n'existe pas en dimension $d \geq 4$, sauf évidemment pour $\alpha = 0$.

Rappelons que les fonctions de l'espace de Sobolev $H^2(\mathbb{R}^d)$ sont toutes continues et tendent vers 0 à l'infini, lorsque $d \in \{1, 2, 3\}$. L'application linéaire $u \in H^2(\mathbb{R}^d) \mapsto u(0) \in \mathbb{C}$ est alors continue. En dimension $d = 1$, les fonctions de $H^2(\mathbb{R})$ sont même C^1 et $u \in H^2(\mathbb{R}) \mapsto u'(0) \in \mathbb{C}$ est aussi continue. Rappelons également que les fonctions de l'espace de Sobolev $H^1(\mathbb{R})$ sont toutes continues et tendent vers 0 à l'infini, ceci n'étant vrai que en dimension $d = 1$. L'espace $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ est dense dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ et dans $H^2(\mathbb{R}^d)$ pour tout $d \geq 1$, pour les normes associées.

Partie 1. H_α n'existe pas en dimension $d \geq 4$

Soit $\eta \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ une fonction quelconque telle que $\eta \equiv 1$ en dehors de la boule de rayon 2 et qui s'annule sur la boule de rayon 1. On pose $\eta_\varepsilon(x) = \eta(x/\varepsilon)$.

1. Soit $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$. Calculer le Laplacien de $\eta_\varepsilon\varphi$ et en déduire que

$$\eta_\varepsilon\varphi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varphi \quad \text{fortement dans } H^2(\mathbb{R}^d)$$

en dimensions $d \geq 5$.

2. Soit $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^4)$, en dimension $d = 4$. Calculer le Laplacien de $|x|^\tau\varphi(x)$ et en déduire que

$$|x|^\tau\varphi \xrightarrow{\tau \rightarrow 0^+} \varphi \quad \text{fortement dans } H^2(\mathbb{R}^4).$$

3. Montrer que pour $\tau > 0$ fixé,

$$\eta_\varepsilon|x|^\tau\varphi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0^+} |x|^\tau\varphi \quad \text{fortement dans } H^2(\mathbb{R}^4).$$

4. En déduire que $C_c^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{0\})$ est dense dans $H^2(\mathbb{R}^d)$ en dimensions $d \geq 4$.
5. Montrer que la fermeture de H^{\min} est le Laplacien H_0 et conclure que H^{\min} ne possède aucune autre extension auto-adjointe que H_0 .

Partie 2. H_α en dimension $d = 1$

Dans toute cette partie on se place en dimension $d = 1$.

6. Montrer que la fermeture de H^{\min} est l'opérateur

$$H_{0,0}u = -u'', \quad D(H_{0,0}) = \{u \in H^2(\mathbb{R}) : u(0) = u'(0) = 0\}.$$

On pourra utiliser, sans le redémontrer, que $C_c^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$ est dense dans l'espace de droite, pour la norme de $H^2(\mathbb{R})$.

7. Montrer que l'adjoint de $H_{0,0}$ est l'opérateur

$$H^{\max}u = -u''_{] - \infty; 0[} - u''_{]0; + \infty[}$$

défini sur le domaine

$$D(H^{\max}) = L^2(\mathbb{R}) \cap H^2(] - \infty; 0[) \cap H^2(]0; + \infty[)$$

qui contient les fonctions de $L^2(\mathbb{R})$ telles que ses dérivées secondes $u''_{] - \infty; 0[}$ et $u''_{]0; + \infty[}$ calculées au sens des distributions sur $] - \infty; 0[$ et $]0; + \infty[$, appartiennent respectivement à $L^2(] - \infty; 0[)$ et à $L^2(]0; + \infty[)$.

Les fonctions de $D(H^{\max})$ sont dans $C^1(\mathbb{R} \setminus \{0\})$ et admettent une limite ainsi que leur dérivée à gauche et à droite de 0. Nous notons ces limites $u(0^-)$, $u(0^+)$, $u'(0^-)$ et $u'(0^+)$. Par la formule des sauts, la dérivée au sens des distributions de $u \in D(H^{\max})$ sur tout \mathbb{R} est alors donnée par

$$u'' = u''_{] - \infty; 0[} + u''_{]0; + \infty[} + (u(0^+) - u(0^-))\delta'_0 + (u'(0^+) - u'(0^-))\delta_0.$$

Ceci suggère de définir l'opérateur H_α sur le domaine

$$D(H_\alpha) = \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}) \cap H^2(] - \infty; 0[) \cap H^2(]0; + \infty[) : u(0^+) = u(0^-), \right. \\ \left. u'(0^+) - u'(0^-) = \alpha u(0) \right\} \quad (\text{B.2})$$

par

$$H_\alpha u = -u'' + \alpha u(0)\delta_0 = -u''_{] - \infty; 0[} - u''_{]0; + \infty[}.$$

En d'autres termes, les fonctions du domaine sont continues sur tout \mathbb{R} et leur dérivée possède un saut qui est proportionnel à $u(0)$. Ce saut permet d'annuler le terme $\alpha u(0)\delta_0$ de sorte que $H_\alpha u$ (interprété au sens des distributions sur \mathbb{R}) soit égal à l'opposé de la dérivée seconde de u sur $\mathbb{R} \setminus \{0\}$.

8. Montrer que l'opérateur H_α ainsi défini est auto-adjoint.
9. Montrer que la forme quadratique de H_α est donnée par

$$\langle u, H_\alpha u \rangle = \int_{\mathbb{R}} |u'(x)|^2 dx + \alpha |u(0)|^2. \quad (\text{B.3})$$

Que vaut le domaine de forme $Q(H_\alpha)$? Comment pourrait-on définir H_α à partir de la forme quadratique (B.3)?

10. Montrer que le spectre de H_α est inclus dans $[0; +\infty[$ lorsque $\alpha \geq 0$.
11. En construisant une suite de Weyl $u_n \rightarrow 0$, montrer que le spectre essentiel de H_α vaut

$$\sigma_{\text{ess}}(H_\alpha) = [0; +\infty[$$

pour tout $\alpha \in \mathbb{R}$, et donc que $\sigma(H_\alpha) = [0; +\infty[$ lorsque $\alpha \geq 0$.

12. Montrer que si $\alpha < 0$, le spectre de H_α vaut

$$\sigma(H_\alpha) = \{\lambda(\alpha)\} \cup [0, +\infty[$$

où

$$\lambda(\alpha) = -\frac{\alpha^2}{4}$$

est une valeur propre simple, de vecteur propre correspondant $f_\alpha(x) = e^{-\frac{\alpha}{2}|x|}$.

13. Montrer que

$$D(H_\alpha) = H^2(\mathbb{R}) \cap H_0^1(\mathbb{R}) + f_\alpha \mathbb{C} = \{u \in H^2(\mathbb{R}) : u(0) = 0\} + f_\alpha \mathbb{C}$$

et que pour $u_0 \in H^2(\mathbb{R}) \cap H_0^1(\mathbb{R})$ et $\beta \in \mathbb{C}$,

$$H_\alpha(u_0 + \beta f_\alpha) = -\Delta u_0 - \frac{\alpha^2}{4} \beta f_\alpha. \quad (\text{B.4})$$

Partie 3. H_α en dimensions $d = 2, 3$

Dans toute cette partie on travaille en dimension $d \in \{2, 3\}$. La construction de H_α est plus difficile. En particulier on ne peut pas se baser sur la forme quadratique (B.3) car $u(0)$ n'est pas bien définie dans $H^1(\mathbb{R}^d)$. Comme en dimension $d = 1$, l'opérateur H_α aura exactement une valeur propre négative, proportionnelle à $-\alpha^2$. Notons que les fonctions de $L^2(\mathbb{R}^d)$ satisfaisant l'équation au sens des distributions

$$(-\Delta + c\alpha^2)f = b(2\pi)^{d/2} \delta_0$$

sont données en Fourier par $\widehat{f}(k) = b(|k|^2 + c\alpha^2)^{-1}$. Elles se comportent comme

$$f(x) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{b(2\pi)^{d/2}}{|\mathbb{S}^{d-1}|} \times \begin{cases} -\log|x| & \text{si } d = 2, \\ |x|^{-1} & \text{si } d = 3. \end{cases}$$

Elle divergent donc toutes en 0 dès que $b \neq 0$, de sorte qu'il est impossible de supposer que b est proportionnel à $f(0)$. Nous allons cependant baser notre opérateur H_α sur ces fonctions, par similarité avec la formule (B.4) en dimension $d = 1$.

Dans la suite nous allons paramétrer H_α par sa plus petite valeur propre $-\lambda < 0$ plutôt que par α et comme il n'y a pas de confusion nous écrirons H_λ . Pour $\lambda > 0$, soit Y_λ la fonction dont la transformée de Fourier vaut

$$\widehat{Y}_\lambda(k) = \frac{1}{|k|^2 + \lambda}$$

et qui résout donc l'équation au sens des distributions

$$-\Delta Y_\lambda + \lambda Y_\lambda = (2\pi)^{d/2} \delta_0$$

14. Montrer que $Y_\lambda \in L^2(\mathbb{R}^d)$ mais que $Y_\lambda \notin H^1(\mathbb{R}^d)$, en dimension $d \in \{2, 3\}$.

15. Montrer que la fermeture de l'opérateur H^{\min} défini sur $D(H^{\min}) = C_c^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{0\})$ est l'opérateur $H_{0,0}u = -\Delta u$ défini sur

$$D(H_{0,0}) = \{u \in H^2(\mathbb{R}^d) : u(0) = 0\} = H_0^2(\mathbb{R}^d \setminus \{0\}).$$

On pourra utiliser, sans le redémontrer, que $C_c^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{0\})$ est dense dans cet espace, pour la norme de $H^2(\mathbb{R}^d)$, en dimension $d \in \{2, 3\}$.

16. Soit

$$D(H_\lambda) = \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}^d) : \exists \beta \in \mathbb{C}, u - \beta Y_\lambda \in D(H_{0,0}) \right\} \quad (\text{B.5})$$

Montrer que si $u \in D(H_\lambda)$, alors β est uniquement déterminé.

17. Soit $u_0 \in D(H_{0,0})$, c'est-à-dire $u_0 \in H^2(\mathbb{R}^d)$ avec $u_0(0) = 0$. Montrer que

$$-\int_{\mathbb{R}^d} Y_\lambda \Delta u_0 = -\lambda \int_{\mathbb{R}^d} Y_\lambda u_0.$$

18. Pour $u = u_0 + \beta Y_\lambda \in D(H_\lambda)$ avec $u_0 \in D(H_{0,0})$ et $\beta \in \mathbb{C}$, on pose maintenant

$$\boxed{H_\lambda(u_0 + \beta Y_\lambda) := -\Delta u_0 - \lambda \beta Y_\lambda.} \quad (\text{B.6})$$

Montrer que H_λ est un opérateur symétrique sur $D(H_\lambda)$, et que $-\lambda$ est une valeur propre de H_λ , de vecteur propre Y_λ .

19. Soit $w \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et $C > 0$ une constante quelconque telle que $C \neq \lambda$. En passant en Fourier, montrer qu'il existe $\beta \in \mathbb{C}$ et $u_0 \in D(H_{0,0})$ tels que

$$(H_\lambda + C)(u_0 + \beta Y_\lambda) = w.$$

En déduire que H_λ est auto-adjoint sur $D(H_\lambda)$.

20. Montrer que

$$\sigma(H_\lambda) = \{-\lambda\} \cup [0; +\infty[.$$

21. On introduit la forme quadratique sur $H^2(\mathbb{R}^d)$ définie par

$$q_{\alpha,\varepsilon}(u) := \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} |\Delta u(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u(x)|^2 dx + \alpha |u(0)|^2.$$

(a) Montrer que $q_{\alpha,\varepsilon}$ est bien définie et coercive sur $H^2(\mathbb{R}^d)$ en dimension $d \in \{2, 3\}$.

(b) Montrer que l'unique opérateur auto-adjoint associé $H_{\alpha,\varepsilon}$ admet des valeurs propres négatives seulement pour $\alpha < 0$. Montrer alors que

$$\sigma(H_{\alpha,\varepsilon}) = \{-\lambda(\alpha, \varepsilon)\} \cup [0; +\infty[$$

où $\lambda(\alpha, \varepsilon) > 0$ est l'unique solution de l'équation

$$\alpha \int_{\mathbb{R}^d} \frac{dk}{\varepsilon |k|^4 + |k|^2 + \lambda(\alpha, \varepsilon)} = -(2\pi)^d,$$

avec l'unique fonction propre associée

$$\widehat{Y_{\alpha,\varepsilon}}(k) = \frac{1}{\varepsilon |k|^4 + |k|^2 + \lambda(\alpha, \varepsilon)}.$$

(c) Que se passe-t-il à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$?

B.2 L'atome d'hydrogène pseudo-relativiste

Nous étudions ici un modèle simplifié pour l'atome d'hydrogène relativiste.

1. En mécanique classique relativiste, l'énergie d'une particule d'impulsion $p \in \mathbb{R}^3$ et de masse m est donnée par la formule $E_{m,c}^{\text{kin}}(p) = \sqrt{c^2 |p|^2 + m^2 c^4} - mc^2$ où $c > 0$ est la vitesse de la lumière.

(a) La vitesse étant définie par $v = \nabla_p E_{m,c}^{\text{kin}}(p)$, vérifier que $|v| < c$.

(b) Montrer que $E_{m,c}^{\text{kin}}(p) = |p|^2 / 2m + O(c^{-2})$ pour tout $p \in \mathbb{R}^3$.

2. Nous introduisons l'opérateur

$$T_{m,c} = \sqrt{-c^2 \hbar \Delta + m^2 c^4} - mc^2.$$

(a) Quel est son domaine d'auto-adjonction ? son spectre ? son domaine de forme $Q(T_{m,c})$?

(b) Montrer que pour tout $\psi \in H^1(\mathbb{R}^3)$

$$\langle T_{m,c}\psi, \psi \rangle \leq \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx, \quad \lim_{c \rightarrow \infty} \langle T_{m,c}\psi, \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(x)|^2 dx. \quad (\text{B.7})$$

3. Nous considérons maintenant la forme quadratique

$$\mathcal{E}(\psi) = \langle T_{m,c}\psi, \psi \rangle - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx.$$

Nous utiliserons l'inégalité de Hardy-Kato qui précise que

$$\forall \varphi \in H^{1/2}(\mathbb{R}^3), \quad \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx \leq \frac{\pi}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |p| |\widehat{\psi}(p)|^2 dp. \quad (\text{B.8})$$

La constante $\pi/2$ est la meilleure possible.

(a) Montrer que l'on peut travailler dans un système d'unités tel que $m/\hbar^2 = e^2/4\pi\epsilon_0 = 1$, mais que nous devons alors garder la vitesse de la lumière c . Dans ces unités nous avons $c \simeq 137$. Dans la suite nous utiliserons la notation $T_{1,c} := T_c$ et, pour l'énergie,

$$\mathcal{E}_c(\psi) = \langle T_c\psi, \psi \rangle - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|} dx, \quad T_c = \sqrt{c^4 - c^2\Delta} - c^2.$$

(b) Montrer que \mathcal{E}_c est bien définie et continue sur $H^{1/2}(\mathbb{R}^3)$.

(c) Montrer que

$$\inf_{\substack{\psi \in H^{1/2}(\mathbb{R}^3), \\ \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 = 1}} \mathcal{E}_c(\psi) \begin{cases} \geq -c^2 & \text{pour } c \geq \pi/2, \\ = -\infty & \text{pour } c < \pi/2. \end{cases}$$

(d) En utilisant l'inégalité de Hardy montrer que l'opérateur $T_c - 1/|x|$ est auto-adjoint sur $H^1(\mathbb{R}^3)$ quand $c > 4$.

(e) Définir $T_c - 1/|x|$ pour $2/\pi < c \leq 4$.

4. Nous montrons maintenant quelques propriétés du spectre de $T_c - 1/|x|$, en supposant pour simplifier que $c > 4$ (qui est le cas physique).

(a) Pour $c > 4$, montrer que

$$|x|^{-1/2}(T_c - 1/|x| + \mu)^{-1}$$

est un opérateur borné.

(b) Montrer que $(T_c + \mu)^{-1}|x|^{-1/2}$ est compact.

(c) En écrivant

$$(T_c - 1/|x| + \mu)^{-1} - (T_c + \mu)^{-1} = (T_c + \mu)^{-1}|x|^{-1}(T_c - 1/|x| + \mu)^{-1},$$

montrer que $\sigma_{\text{ess}}(T_c - 1/|x|) = \sigma(T_c) = [0, \infty)$.

(d) Montrer que $T_c - 1/|x|$ possède une infinité de valeurs propres négatives qui s'accablent en 0.

5. Nous étudions maintenant la limite non relativiste $c \rightarrow \infty$ de la première valeur propre λ_1^c de l'opérateur $T_c - 1/|x|$ (un argument similaire permet de traiter les valeurs propres suivantes). Nous appelons $\lambda_1 = -1/2$ la première valeur propre de $-\Delta/2 - 1/|x|$, dont nous rappelons qu'elle est non dégénérée, de fonction propre associée $\psi = \pi^{-1/2}e^{-|x|}$.

(a) Montrer que $\lambda_1^c \leq \lambda_1$ pour tout $c > 4$.

- (b) Montrer que pour tout
- $p \in \mathbb{R}^3$
- et tout
- $\kappa < c$
- ,

$$\sqrt{c^4 + c^2|p|^2} - c^2 \geq \kappa|p| - C_1(\kappa, c)$$

et

$$\left(\sqrt{c^4 + c^2|p|^2} - c^2\right)^2 \geq \kappa^2|p|^2 - C_2(\kappa, c)$$

pour des constantes $C_j(\kappa, c)$ que l'on déterminera.

- (c) En déduire que
- λ_1^c
- est bornée inférieurement quand
- $c > 4$
- .
-
- (d) Soit
- $\{c_n\}$
- une suite telle que
- $4 < c_n \rightarrow \infty$
- et
- $\{\psi_n\} \subset H^1(\mathbb{R}^3)$
- telle que
- $\|\psi_n\| = 1$
- et

$$(T_{c_n} - 1/|x|)\psi_n = \lambda_1^{c_n} \psi_n. \quad (\text{B.9})$$

Montrer que $\{\psi_n\}$ est bornée dans $H^1(\mathbb{R}^3)$. À une sous-suite près on peut donc supposer que $\psi_n \rightharpoonup \psi'$ faiblement dans $H^1(\mathbb{R}^3)$ et fortement dans $L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^3)$, et que $\lambda_1^{c_n} \rightarrow \lambda_1'$. Montrer alors que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi_n(x)|^2}{|x|} dx = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi'(x)|^2}{|x|} dx.$$

Prendre le produit scalaire avec ψ_n dans (B.9) et conclure que $\psi' \neq 0$.

- (e) Montrer que la limite faible
- ψ'
- résout l'équation
- $(-\Delta/2 - 1/|x|)\psi' = \lambda_1' \psi'$
- dans
- $H^{-1}(\mathbb{R}^3)$
- . Conclure que
- $\lambda_1' = \lambda_1$
- et que
- $\psi' = \alpha\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$
- .
-
- (f) Montrer que

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \mathcal{E}_{c_n}(\psi_n) \geq \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi'|^2 - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi'(x)|^2}{|x|} dx.$$

- (g) En déduire que
- $|\alpha| = 1$
- , et que
- $\psi_n \rightarrow \alpha\psi$
- fortement dans
- $H^1(\mathbb{R}^3)$
- .

Index

- adjoint, 54
- atome d'hydrogène
 - état fondamental, 17
 - auto-adjonction, 81
 - classique, 9
 - pseudo-relativiste, 266
 - quantique, 12, 41
 - spectre, 20
 - spectre discret, 182
- atomes bosoniques, 234
- atomes et molécules
 - Hamiltonien, 205
 - spectre, 228
- auto-adjoint, opérateur
 - bornés, 62
 - caractérisation, 62
 - définition, 60
 - domaine et forme quadratique, 86
 - réalisation de Friedrichs, 89
 - spectre, 63
- borné inférieurement, opérateur, 83
- bosons, 203, 222, 243
- calcul fonctionnel, 112
- Cauchy, formule, 126
- chaleur, équation, 132
- coercif, opérateur, 83
- cœur d'un opérateur auto-adjoint, 79
- commutateur
 - caractérisation, 145
 - contre-exemples, 73
- compact
 - opérateur, 157
 - relativement, 170
- conditions aux bords
 - Born-von Karman, 70, 74, 88
 - Dirichlet, 70, 88, 167
 - Neumann, 70, 88, 167
 - périodiques, 70, 73, 74, 243
 - Robin, 70, 88, 179, 198
- Courant-Fischer, formule, 175
- Cwikel-Lieb-Rozenbljum, inégalité, 183
- cyclique
 - sous-espace, 122
 - vecteur, 122, 148
- décalage, opérateur, 49
- densité à k particules, 219
- dilatations
 - générateur, 142
 - groupe, 142
- essentiellement auto-adjoint, 63
- état quantique, 38
- extension, 48
- Fan, formule, 180
- fermé, opérateur, 50
- fermeture d'un opérateur, 51
- fermions, 180, 203, 222, 243
- Feynman-Kac, formule, 37
- fonction d'onde, 12
- forme quadratique
 - d'un opérateur auto-adjoint, 86
 - d'un opérateur symétrique, 84
 - définition, 84
 - et racine carrée, 116
 - réalisation de Friedrichs, 89
- Fourier, transformation, 13
- Friedrichs, réalisation auto-adjointe, 89
- gaz de Fermi, 243
- graphe, 48
- Hamilton, équations, 11, 24
- Hamiltonien
 - opérateur, 20
 - pour N particules, 201
 - système, 24
- Hardy, inégalité, 16, 44, 267
- Hartree-Fock, 225
- Hausdorff-Young
 - inégalité, 162
- Heisenberg, principe d'incertitude, 15
- Helffer-Sjöstrand, formule, 147
- Hilbert-Schmidt, opérateur, 158
- HVZ, théorème, 210
- impulsion sur \mathbb{R}^d

- auto-adjonction, 65
 - fermeture, 52
 - générateur des translations, 136
 - spectre, 65
- impulsion sur $]0; +\infty[$
 - fermeture, 53
 - spectre, 60
- impulsion sur $]0; 1[$
 - adjoint, 55
 - auto-adjonction, 67
 - fermeture, 52
 - spectre, 59
 - symétrie, 57
- IMS, formule, 216
- indices de défaut, 74
- invariant, espace, 147
- ionisation, conjecture, 229

- Kato, inégalité, 19
- ket, bra, 157
- KLMN, théorème, 92

- Laplacien sur Ω
 - forme quadratique, 101
 - spectre, 166
- Laplacien sur \mathbb{R}^d
 - auto-adjonction, 65
 - fermeture, 52
 - forme quadratique, 86
 - spectre, 65
- Laplacien sur $]0; 1[$
 - adjoint, 56
 - auto-adjonction, 61, 69
 - fermeture, 53
 - forme quadratique, 88
 - périodique, 74
 - résolvante compacte, 165
 - spectre, 60
 - symétrie, 57
- Lax-Milgram, 87
- Lieb-Thirring, inégalités, 196, 227

- magnétique, champ, 81, 103
- maximum, principe, 35
- mesure spectrale, 39, 111
- Meyers-Serrin, théorème, 246
- min-max, formule, 175
- moment cinétique, 138
- multiplication, opérateur, 105

- N particules, opérateur
 - auto-adjonction, 207
 - définition, 202
 - extension de Friedrichs, 209
 - sans interaction, 222
 - spectre essentiel, 210
- Newton, équations, 11, 24

- observables physiques, 39
- ondes, équation, 133
- opérateur, 47
- oscillateur harmonique, 96, 168

- perturbation
 - relativement bornée, 79
 - relativement compacte, 170
- Pohožaev, identité, 21, 143
- potentiel de Coulomb, 9, 197
- potentiel delta, 263
- projections spectrales, 124, 148, 150
- puissance d'un opérateur, 116

- quantification, 42
- quantique, mécanique
 - formalisme mathématique, 38

- régularité elliptique, 248, 260
- résolvante
 - compacte, 164
 - définition, 49
 - norme, 111
- Rayleigh-Ritz, formule, 175
- relativement bornés, opérateurs, 79
- Rellich-Kato, théorème, 78
- Rellich-Kondrachov, théorème, 258
- restriction au bord, 247, 251
- Riesz-Friedrichs, théorème, 90
- rotations, groupe, 138

- Schrödinger, équation
 - dépendant du temps, 23, 40, 128
 - stationnaire, 17
- Schrödinger, opérateur
 - auto-adjonction, 80
 - confiné, 96, 168
 - limite semi-classique, 193
 - périodique, 103
 - réalisation de Friedrichs, 93
 - radial, 147
 - spectre discret, 182
 - spectre essentiel, 174
- semi-classique, limite, 193
- Sobolev
 - espace, 245
 - fractionnaire, 249
 - inégalité, 15, 254
 - prolongement, 253
 - relèvement, 252

- trace, 251
- somme de valeurs propres, 180
- spectral, théorème, 109
- spectre
 - définition, 49
 - discret, 149
 - essentiel, 149, 170
 - stabilité, 149
- spin, 13
- Stone
 - formule, 127, 148
 - théorème, 134
- $SU(2)$, action, 140
- symétrique, opérateur
 - définition, 57
 - spectre, 57

- Thomas-Fermi, 236
- translations, groupe, 136

- unitaires, groupe, 134

- Viriél, identité, 21, 143

- Weyl
 - asymptotique des valeurs propres, 190
 - caractérisation du spectre essentiel, 153
 - invariance du spectre essentiel, 171
 - suite, 64
 - suite singulière, 154

Bibliographie

- [AF03] R. A. ADAMS AND J. J. F. FOURNIER, *Sobolev spaces*, vol. 140 of Pure and Applied Mathematics (Amsterdam), Elsevier/Academic Press, Amsterdam, second ed., 2003.
- [Alo18] F. ALOUGES, *Analyse variationnelle des équations aux dérivées partielles*. Cours MAP431 de l'École Polytechnique, 2018.
- [Bac91] V. BACH, *Ionization energies of bosonic Coulomb systems*, Lett. Math. Phys., 21 (1991), pp. 139–149.
- [BD06] J.-L. BASDEVANT AND J. DALIBARD, *Mécanique quantique*, École Polytechnique, 2006.
- [BL83] R. BENGURIA AND E. H. LIEB, *Proof of the Stability of Highly Negative Ions in the Absence of the Pauli Principle*, Phys. Rev. Lett., 50 (1983), pp. 1771–1774.
- [BLLS93] V. BACH, R. LEWIS, E. H. LIEB, AND H. SIEDENTOP, *On the number of bound states of a bosonic N -particle Coulomb system*, Math. Z., 214 (1993), pp. 441–459.
- [BLR12] D. BERNARD, Y. LASZLOS, AND D. RENARD, *Éléments de théorie des groupes et symétries quantiques*. Cours MAT/PHYS575 de l'École Polytechnique, 2012.
- [BO27] M. BORN AND R. OPPENHEIMER, *Quantum theory of molecules*, Ann. Physics, 84 (1927), pp. 457–484.
- [BR02] O. BRATELLI AND D. W. ROBINSON, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics. 1 : C^* - and W^* -Algebras. Symmetry Groups. Decomposition of States*, Texts and Monographs in Physics, Springer, 2nd ed., 2002.
- [Bre94] H. BREZIS, *Analyse fonctionnelle, Théorie et applications*, Dunod, sciences sup ed., 1994.
- [Bre10] ———, *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*, Springer, universitext ed., 2010.
- [CFKS87] H. L. CYCON, R. G. FROESE, W. KIRSCH, AND B. SIMON, *Schrödinger operators with application to quantum mechanics and global geometry*, Texts and Monographs in Physics, Springer-Verlag, Berlin, study ed., 1987.
- [Cou20] R. COURANT, *Über die Eigenwerte bei den Differentialgleichungen der mathematischen Physik*, Math. Z., 7 (1920), pp. 1–57.
- [CTDL13a] C. COHEN-TANNOUJDI, B. DIU, AND F. LALOË, *Mécanique quantique : Tome 1, Fondements*, Savoirs actuels, Coédition CNRS, 2013.
- [CTDL13b] ———, *Mécanique quantique : Tome 2, Applications et exercices corrigés*, Savoirs actuels, Coédition CNRS, 2013.
- [CTDL17] ———, *Mécanique quantique : Tome 3, Fermions, bosons, photons, corrélations et intrication*, Savoirs actuels, Coédition CNRS, 2017.
- [Cwi77] M. CWIKEL, *Weak type estimates for singular values and the number of bound states of Schrodinger operators*, Ann. of Math., 106 (1977), pp. pp. 93–100.

- [CX97] J.-Y. CHEMIN AND C.-J. XU, *Inclusions de Sobolev en calcul de Weyl-Hörmander et champs de vecteurs sous-elliptiques*, Ann. Sci. École Norm. Sup. (4), 30 (1997), pp. 719–751.
- [Dav95] E. B. DAVIES, *Spectral theory and differential operators*, vol. 42 of Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [Dav07] ———, *Linear operators and their spectra*, vol. 106 of Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [Dim11] J. DIMOCK, *Quantum mechanics and quantum field theory*, Cambridge University Press, Cambridge, 2011. A mathematical primer.
- [DL88] R. DAUTRAY AND J.-L. LIONS, *Évolution : semi-groupe, variationnel*, vol. 8 of Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques, Masson, Paris, 1988.
- [DR18] R. DANCHIN AND P. RAPHAËL, *Analyse non linéaire : sur la stabilité des ondes solitaires*. Cours MAT554 de l'École Polytechnique, 2018.
- [Ehr27] P. EHRENFEST, *Bemerkung über die angenäherte gültigkeit der klassischen mechanik innerhalb der quantenmechanik*, Zeitschrift für Physik, 45 (1927), pp. 455–457.
- [Eng88] B.-G. ENGLERT, *Semiclassical Theory of Atoms*, vol. 300 of Lecture Notes in Physics, Springer Verlag, Berlin, 1988.
- [Eva10] L. C. EVANS, *Partial differential equations*, vol. 19 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, second ed., 2010.
- [Fan49] K. FAN, *On a Theorem of Weyl Concerning Eigenvalues of Linear Transformations. I*, Proc. Nat. Acad. Sci. U. S. A., 35 (1949), pp. 652–655.
- [Fer27] E. FERMI, *Un metodo statistico per la determinazione di alcune priorietà dell'atome*, Rend. Accad. Naz. Lincei, 6 (1927), pp. 602–607.
- [Fis05] E. FISCHER, *Über quadratische Formen mit reellen Koeffizienten*, Monatsh. Math. Phys., 16 (1905), pp. 234–249.
- [FLLØS16] S. FOURNAIS, J. LAMPART, M. LEWIN, AND T. ØSTERGAARD SØRENSEN, *Coulomb potentials and Taylor expansions in Time-Dependent Density Functional Theory*, Phys. Rev. A, 93 (2016), p. 062510.
- [FLS14] R. FEYNMAN, R. LEIGHTON, AND M. SANDS, *Le cours de physique de Feynman - Mécanique quantique*, Dunod, 2014.
- [FLS18] S. FOURNAIS, M. LEWIN, AND J. P. SOLOVEJ, *The semi-classical limit of large fermionic systems*, Calc. Var. Partial Differ. Equ., (2018), pp. 57–105.
- [Fri03] G. FRIESECKE, *The multiconfiguration equations for atoms and molecules : charge quantization and existence of solutions*, Arch. Ration. Mech. Anal., 169 (2003), pp. 35–71.
- [Gie00] F. GIERES, *Mathematical surprises and Dirac's formalism in quantum mechanics*, Rep. Prog. Phys., 63 (2000), p. 1893.
- [GLPV18] F. GOLSE, Y. LASZLO, F. PACARD, AND C. VITERBO, *Analyse réelle et complexe*. Cours MAT311/321 de l'École Polytechnique, 2018.
- [Gol18] F. GOLSE, *Distribution, analyse de Fourier et EDP*. Cours MAT432 de l'École Polytechnique, 2018.
- [Gri85] P. GRISVARD, *Elliptic problems in nonsmooth domains*, vol. 24 of Monographs and Studies in Mathematics, Pitman (Advanced Publishing Program), Boston, MA, 1985.

- [Hal13] B. C. HALL, *Quantum theory for mathematicians*, vol. 267 of Graduate Texts in Mathematics, Springer, New York, 2013.
- [Hel13] B. HELFFER, *Spectral Theory and Its Applications*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, 2013.
- [HH77] M. HOFFMANN-OSTENHOF AND T. HOFFMANN-OSTENHOF, *Schrödinger inequalities and asymptotic behavior of the electron density of atoms and molecules*, Phys. Rev. A, 16 (1977), pp. 1782–1785.
- [HS96] P. HISLOP AND I. M. SIGAL, *Introduction to spectral theory with application to Schrödinger operators*, Springer (New York), 1996.
- [HU30] E. A. HYLLERAAS AND B. UNDHEIM, *Numerische berechnung der 2 S-terme von ortho- und par- helium*, Z. Phys., 65 (1930), pp. 759–772.
- [Hun66] W. HUNZIKER, *On the spectra of Schrödinger multiparticle Hamiltonians*, Helv. Phys. Acta, 39 (1966), pp. 451–462.
- [Ism61] R. S. ISMAGILOV, *Conditions for the semiboundedness and discreteness of the spectrum in the case of one-dimensional differential operators*, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 140 (1961), pp. 33–36. English transl. Soviet Math. Dokl. 2 (1961), 1137–1140.
- [Ivr16] V. IVRII, *100 years of Weyl’s law*, Bull. Math. Sci., 6 (2016), pp. 379–452.
- [Kac66] M. KAC, *Can one hear the shape of a drum?*, Amer. Math. Monthly, 73 (1966), pp. 1–23.
- [Kat51] T. KATO, *Fundamental properties of Hamiltonian operators of Schrödinger type*, Trans. Amer. Math. Soc., 70 (1951), pp. 195–221.
- [Lew11] M. LEWIN, *Geometric methods for nonlinear many-body quantum systems*, J. Funct. Anal., 260 (2011), pp. 3535–3595.
- [Lew15] ———, *Mean-field limit of Bose systems : rigorous results*, in Proceedings of the International Congress of Mathematical Physics, 2015. ArXiv e-prints.
- [Lew17] ———, *Éléments de théorie spectrale : le Laplacien sur un ouvert borné*. Notes de cours de Master 2, 2017.
- [LHB11] J. LÖRINCZI, F. HIROSHIMA, AND V. BETZ, *Feynman-Kac-Type Theorems and Gibbs Measures on Path Space : With Applications to Rigorous Quantum Field Theory*, Gruyter - de Gruyter Studies in Mathematics, Walter de Gruyter GmbH & Company KG, 2011.
- [Lie76] E. H. LIEB, *The stability of matter*, Rev. Mod. Phys., 48 (1976), pp. 553–569.
- [Lie80] ———, *The number of bound states of one-body Schrödinger operators and the Weyl problem*, in Geometry of the Laplace operator, Proc. Sympos. Pure Math., XXXVI, Amer. Math. Soc., Providence, R.I., 1980, pp. 241–252. (Proc. Sympos. Pure Math., Univ. Hawaii, Honolulu, Hawaii, 1979).
- [Lie81] ———, *Thomas-Fermi and related theories of atoms and molecules*, Rev. Mod. Phys., 53 (1981), pp. 603–641.
- [Lie84] ———, *Bound on the maximum negative ionization of atoms and molecules*, Phys. Rev. A, 29 (1984), pp. 3018–3028.
- [Lie90] ———, *The stability of matter : from atoms to stars*, Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.), 22 (1990), pp. 1–49.
- [LL75] L. LANDAU AND E. LIFCHITZ, *Physique théorique. Vol. 3. Mécanique quantique*, Éditions Mir, 1975.
- [LL01] E. H. LIEB AND M. LOSS, *Analysis*, vol. 14 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, 2nd ed., 2001.
- [LL13] E. LENZMANN AND M. LEWIN, *Dynamical ionization bounds for atoms*, Analysis & PDE, 6 (2013), pp. 1183–1211.

- [LM68] J.-L. LIONS AND E. MAGENES, *Problèmes aux limites non homogènes et applications. Vol. 1*, Travaux et Recherches Mathématiques, No. 17, Dunod, Paris, 1968.
- [LM77] J. M. LEINAAS AND J. MYRHEIM, *On the theory of identical particles*, Nuovo Cimento B Serie, 37 (1977), pp. 1–23.
- [LNR14] M. LEWIN, P. T. NAM, AND N. ROUGERIE, *Derivation of Hartree’s theory for generic mean-field Bose systems*, Adv. Math., 254 (2014), pp. 570–621.
- [LS77] E. H. LIEB AND B. SIMON, *The Thomas-Fermi theory of atoms, molecules and solids*, Adv. Math., 23 (1977), pp. 22–116.
- [LS10] E. H. LIEB AND R. SEIRINGER, *The Stability of Matter in Quantum Mechanics*, Cambridge Univ. Press, 2010.
- [LSST88] E. H. LIEB, I. M. SIGAL, B. SIMON, AND W. THIRRING, *Approximate neutrality of large- Z ions*, Commun. Math. Phys., 116 (1988), pp. 635–644.
- [LSSY05] E. H. LIEB, R. SEIRINGER, J. P. SOLOVEJ, AND J. YNGVASON, *The mathematics of the Bose gas and its condensation*, Oberwolfach Seminars, Birkhäuser, 2005.
- [LT75] E. H. LIEB AND W. E. THIRRING, *Bound on kinetic energy of fermions which proves stability of matter*, Phys. Rev. Lett., 35 (1975), pp. 687–689.
- [LT76] ———, *Inequalities for the moments of the eigenvalues of the Schrödinger hamiltonian and their relation to Sobolev inequalities*, Studies in Mathematical Physics, Princeton University Press, 1976, pp. 269–303.
- [Mac33] J. K. L. MACDONALD, *Successive approximations by the Rayleigh-Ritz variation method*, Phys. Rev., 43 (1933), pp. 830–833.
- [Mor79] J. D. MORGAN, III, *Schrödinger operators whose potentials have separated singularities*, J. Operator Theory, 1 (1979), pp. 109–115.
- [MS80] J. D. MORGAN, III AND B. SIMON, *Behavior of molecular potential energy curves for large nuclear separations*, Int. J. Quantum Chem., 17 (1980), pp. 1143 – 1166.
- [MTWB10] N. T. MAITRA, T. N. TODOROV, C. WOODWARD, AND K. BURKE, *Density-potential mapping in time-dependent density-functional theory*, Phys. Rev. A, 81 (2010), p. 042525.
- [Nam12] P. T. NAM, *New bounds on the maximum ionization of atoms*, Commun. Math. Phys., 312 (2012), pp. 427–445.
- [Poh65] S. I. POHOŽAEV, *On the eigenfunctions of the equation $\Delta u + \lambda f(u) = 0$* , Dokl. Akad. Nauk SSSR, 165 (1965), pp. 36–39.
- [Poi90] H. POINCARÉ, *Sur les Équations aux Dérivées Partielles de la Physique Mathématique*, Amer. J. Math., 12 (1890), pp. 211–294.
- [Rel37] F. RELICH, *Störungstheorie der Spektralzerlegung. IV.*, Math. Ann., 116 (1937), pp. 555–570.
- [Rem18] B. REMY, *Analyse fonctionnelle*. Cours MAT452 de l’École Polytechnique, 2018.
- [Rit09] W. RITZ, *über eine neue methode zur lösung gewisser variationsprobleme der mathematischen physik.*, J. Reine Angew. Math., 135 (1909), pp. 1–61.
- [Rou16] N. ROUGERIE, *Théorèmes de de Finetti, limites de champ moyen et condensation de Bose-Einstein*, Spartacus-idh, Paris, 2016. Cours Peccot au Collège de France (2014).
- [Roz72] G. V. ROZENBLJUM, *Distribution of the discrete spectrum of singular differential operators*, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 202 (1972), pp. 1012–1015.

- [RS72] M. REED AND B. SIMON, *Methods of Modern Mathematical Physics. I. Functional analysis*, Academic Press, 1972.
- [RS75] ———, *Methods of Modern Mathematical Physics. II. Fourier analysis, self-adjointness*, Academic Press, New York, 1975.
- [RS78] ———, *Methods of Modern Mathematical Physics. IV. Analysis of operators*, Academic Press, New York, 1978.
- [Rus82] M. B. RUSKAI, *Absence of discrete spectrum in highly negative ions : II. Extension to fermions*, Commun. Math. Phys., 85 (1982), pp. 325–327.
- [Sig82] I. M. SIGAL, *Geometric methods in the quantum many-body problem. Non existence of very negative ions*, Commun. Math. Phys., 85 (1982), pp. 309–324.
- [Sig84] ———, *How many electrons can a nucleus bind?*, Annals of Physics, 157 (1984), pp. 307–320.
- [Sim77] B. SIMON, *Geometric methods in multiparticle quantum systems*, Commun. Math. Phys., 55 (1977), pp. 259–274.
- [Sim79] ———, *Trace ideals and their applications*, vol. 35 of London Mathematical Society Lecture Note Series, Cambridge University Press, Cambridge, 1979.
- [Sim05] ———, *Functional integration and quantum physics*, AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, second ed., 2005.
- [Sol90] J. P. SOLOVEJ, *Asymptotics for bosonic atoms*, Lett. Math. Phys., 20 (1990), pp. 165–172.
- [Ste73] L. A. STEEN, *Highlights in the history of spectral theory*, The American Mathematical Monthly, 80 (1973), pp. 359–381.
- [Str71] J. STRUTT (LORD RAYLEIGH), *Some general theorems relating to vibrations*, Proc. London Math. Soc., s1-4 (1871), pp. 357–368.
- [Tes09] G. TESCHL, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics; With Applications to Schrödinger Operators*, vol. 99 of Graduate Studies in Mathematics, Amer. Math. Soc, Providence, RI, 2009.
- [Thi02] W. E. THIRRING, *Quantum Mathematical Physics*, vol. Atoms, Molecules and Large Systems, Springer, Second Edition 2002.
- [Tho27] L. H. THOMAS, *The calculation of atomic fields*, Proc. Camb. Philos. Soc., 23 (1927), pp. 542–548.
- [Van64] C. VAN WINTER, *Theory of finite systems of particles. I. The Green function*, Mat.-Fys. Skr. Danske Vid. Selsk., 2 (1964), p. 60 pp.
- [vN30] J. VON NEUMANN, *Allgemeine Eigenwerttheorie Hermitescher Funktionaloperatoren*, Math. Ann., 102 (1930), pp. 49–131.
- [vN32] ———, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Springer Verlag (Berlin), 1932.
- [VZ77] S. VUGALTER AND G. M. ZHISLIN, *Finiteness of a discrete spectrum of many-particle hamiltonians in symmetry spaces (coordinate and momentum representations)*, Teoret. Mat. Fiz., 32 (1977), pp. 70–87.
- [Wei87] J. WEIDMANN, *Spectral theory of ordinary differential operators*, vol. 1258 of Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, 1987.
- [Wey12] H. WEYL, *Das asymptotische verteilungsgesetz der eigenwerte linearer partieller differentialgleichungen (mit einer anwendung auf die theorie der hohlraumstrahlung)*, Math. Ann., 71 (1912), pp. 441–479.
- [Yaf76] D. YAFAEV, *On the point spectrum in the quantum-mechanical many-body problem*, Math. USSR Izv., 40 (1976), pp. 861–896. English translation.

-
- [Zhi60] G. M. ZHISLIN, *Discussion of the spectrum of Schrödinger operators for systems of many particles. (in Russian)*, Trudy Moskovskogo matematicheskogo obščestva, 9 (1960), pp. 81–120.
- [Zhi71] ———, *On the finiteness of the discrete spectrum of the energy operator of negative atomic and molecular ions*, Teoret. Mat. Fiz., 21 (1971), pp. 332–341.
- [ZS65] G. M. ZHISLIN AND A. G. SIGALOV, *The spectrum of the energy operator for atoms with fixed nuclei on subspaces corresponding to irreducible representations of the group of permutations*, Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Mat., 29 (1965), pp. 835–860.