

Analyse Semiclassique, Résonances et Contrôle de l'équation de Schrödinger

Thierry Ramond
Mathématiques, Université Paris Sud, (UMR CNRS 8628), France
mail: thierry.ramond@math.u-psud.fr

Juin 2005

Table des matières

1	Introduction	5
1.1	Eléments de mécanique quantique	5
1.1.1	Mécanique classique	5
1.1.2	Mécanique quantique	6
1.2	L'oscillateur harmonique	10
1.2.1	Valeurs propres de l'oscillateur harmonique	11
1.2.2	Approximation harmonique	15
1.3	Diffusion quantique et résonances en dimension 1	17
1.3.1	Solutions de Jost et Matrice de diffusion	17
1.3.2	Dilatation analytique et résonances	20
1.3.3	Quelques exemples	22
1.4	Eléments de théorie spectrale	23
1.4.1	Opérateurs non-bornés	24
1.4.2	Spectre et résolvante	27
1.4.3	Le théorème spectral pour les opérateurs autoadjoints	30
1.4.4	Perturbation d'opérateurs autoadjoints	33
2	Analyse semiclassique	37
2.1	Transformation de F.B.I. et Microsupport	37
2.1.1	Définition et exemples	37
2.1.2	Propriétés	39

2.1.3	Microsupport	42
2.2	Calcul h -pseudodifférentiel	43
2.2.1	Opérateurs de $\mathcal{S}$ dans $\mathcal{S}'$	44
2.2.2	Calcul symbolique	47
2.2.3	Opérateurs h -pseudodifférentiels	49
2.3	Estimations microlocales à poids exponentiels	51
2.3.1	Enoncé et preuve	51
2.3.2	Quelques applications	55
2.4	Microsupport des solutions d'EDP	59
2.4.1	Ensemble caractéristique	59
2.4.2	Le théorème de propagation	60
3	Résonances quantiques	65
3.1	Plusieurs définitions	65
3.1.1	Dilatation analytique	65
3.1.2	Prolongement méromorphe la résolvante	66
3.1.3	Projecteurs de Riesz et pôles de la résolvante	69

L'étude mathématique des résonances quantiques en régime semiclassique a maintenant une vingtaine d'années, et les techniques développées ainsi que les résultats obtenus diffusent largement dans d'autres domaines des EDP. On propose dans ce cours de passer en revue quelques uns des résultats les plus frappant dans ce domaine, où la mécanique quantique s'interprète souvent en termes de quantités classiques. On s'appuiera sur l'approche due à A. Martinez de l'arsenal technique semiclassique développé principalement par B. Helffer et J.Sjöstrand. Enfin, suivant des travaux de N. Burq, on verra que des questions liées au contrôle de l'équation de Schrödinger peuvent se ramener aux mêmes estimations de résolvante pour l'opérateur de Schrödinger semiclassique, que celles vues pour l'étude des résonances.

Ces notes de cours ne contiennent pas de matériel original. Pour l'essentiel, elles reposent sur le livre d'André Martinez [20], sur celui de Mouez Dimassi et Johannes Sjöstrand [6], et sur des articles de W. Hunziker [16], et Nicolas Burq et Maciej Zworski [3]. Pour le résultat sur la zone sans résonance en l'absence de trajectoire captée, on suit les idées d'une preuve communiquée par Christian Gérard. Enfin Jean-François Bony a contribué à l'amélioration de ces notes par de nombreuses suggestions.

Chapitre 1

Introduction

1.1 Éléments de mécanique quantique

1.1.1 Mécanique classique

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

$$(1.1.1) \quad mx''(t) = F(x(t)).$$

La dérivée $x'(t)$ est la vitesse de la particule à l'instant t , et $x''(t)$ son accélération. De manière équivalente, l'équation (1.1.1) peut s'écrire

$$(1.1.2) \quad \begin{cases} x'(t) = \frac{1}{m}\xi'(t), \\ \xi'(t) = -F(x(t)), \end{cases}$$

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

$$(1.1.3) \quad H(x, \xi) = \begin{pmatrix} \xi/m \\ F(x) \end{pmatrix}.$$

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

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

$$(1.1.4) \quad p(t) = \frac{1}{2m} \xi(t)^2 + V(x(t)),$$

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

$$(1.1.5) \quad \partial_t p(t) = \frac{1}{m} \xi(t) \cdot \partial_t \xi(t) + \nabla V(x(t)) \cdot \partial_t x(t) = 0,$$

en utilisant (1.1.2).

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

$$(1.1.6) \quad H(x, \xi) = H_p(x, \xi) = \partial_\xi p(x, \xi) \partial_x - \partial_x p(x, \xi) \partial_\xi.$$

1.1.2 Mécanique quantique

Plusieurs expériences physiques ont conduit à des résultats que la mécanique classique ne pouvait pas expliquer, et qui semblaient même contradictoires entre eux. En particulier, l'étude du rayonnement du corps noir, puis la mise en évidence de l'effet photoélectrique, semblaient suggérer que la lumière était constituée de particules individualisées, d'énergie bien déterminée auxquelles on donna le nom de quanta. D'un autre côté l'expérience des fentes de Young, montrait que la lumière avait un comportement d'onde, susceptible d'engendrer des figures de type franges d'interférences.

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

Onde plane et équation de Schrödinger

On appelle onde plane de vecteur d'onde k et de pulsation ω la fonction

$$(1.1.7) \quad \phi(t, x) = e^{i(k \cdot x - \omega t)}.$$

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

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

$$(1.1.8) \quad \xi = h\omega = \hbar\nu,$$

où $\nu = 2\pi\omega$ est la fréquence de l'onde plane, et $\hbar = h/2\pi$, et ce choix s'est révélé judicieux. On note aussi $E = h\nu = \hbar\omega$ l'énergie de la particule, et avec ces notations, l'onde plane (1.1.7) s'écrit

$$(1.1.9) \quad \phi(t, x) = e^{i(\xi \cdot x - Et)/\hbar}$$

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

$$(1.1.10) \quad E_c \phi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(t, x), \quad \Delta = \sum_{j=1}^d \partial_j^2.$$

Si la particule est placée dans un potentiel $V(x)$, son énergie totale E est la somme de V et de son énergie cinétique. Notant que, par (1.1.9), $E\phi(t, x) = \frac{\hbar}{i} \partial_t \phi(t, x)$, on obtient l'équation de Schrödinger ;

$$(1.1.11) \quad \frac{\hbar}{i} \partial_t \phi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(t, x) + V(x) \phi(t, x).$$

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

$$(1.1.12) \quad P(x, hD_x) = -\frac{h^2}{2m} \Delta + V(x).$$

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

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

$$(1.1.13) \quad \|\phi(t, \cdot)\|_{L^2} = \int |\phi(t, x)|^2 dx = 1.$$

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

$$(1.1.14) \quad \|\mathbf{1}_\Omega(x) \phi(t, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \left(\int \mathbf{1}_\Omega(x) |\phi(t, x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

est la probabilité de présence de la particule dans la région $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ à l'instant t . Il faut noter que l'onde plane (1.1.9) n'est pas dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, mais que toute fonction de $L^2(\mathbb{R}^d)$ s'écrit comme superposition d'ondes planes (on parle de paquet d'ondes)

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

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

$$(1.1.15) \quad g(t, x) = \int e^{ix \cdot \xi / \hbar} e^{-itE/\hbar} e^{-(\xi - \eta)^2 / 2\hbar} d\xi.$$

On est tout de suite confronté au problème suivant : l'équation de Schrödinger (1.1.11) n'a pas de sens immédiat pour une fonction $\phi(t, \cdot)$ de $L^2(\mathbb{R}^d)$. On peut toujours considérer que $P(x, \hbar D_x)\phi(t, \cdot)$ est une distribution, mais l'égalité (1.1.11) pose la question de savoir si $P(x, \hbar D_x)\phi(t, \cdot)$ est une fonction de $L^2(\mathbb{R}^d)$. C'est Von Neumann qui a mis au point au début des années 1930 les notions mathématiques permettant de répondre correctement à ces questions : la théorie spectrale des opérateurs non-bornés (d'ailleurs la théorie des distributions de Laurent Schwartz est postérieure).

Puisque le potentiel V est indépendant de t , il est raisonnable de chercher des solutions de (1.1.11) à variables séparées t et x , c'est-à-dire sous la forme $\phi(t, x) = a(t)u(x)$. On obtient pour une certaine constante $E \in \mathbb{C}$,

$$(1.1.16) \quad a(t) = e^{-iEt}, \quad \text{et } P(x, \hbar D_x)u(x) = Eu(x),$$

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

Observables et Principe d'Incertainité

On a été conduit à associer à la fonction énergie $p(x, \xi)$ de la mécanique classique un opérateur $P(x, \hbar D_x)$, qu'on désigne sous le nom d'observable énergie quantique. De manière générale, on veut pouvoir associer une telle observable quantique à toute fonction raisonnable de (x, ξ) . C'est procédé est appelé quantification, (ne pas confondre avec la quantification des niveaux d'énergies évoquée plus haut), et on détaillera ce point dans le chapitre consacré au calcul pseudodifférentiel. Il n'y a cependant pas une manière unique de procéder, la raison étant essentiellement que les observables quantiques associées à $q(x, \xi) = x$ et $p(x, \xi) = \xi$ ne commutent pas. Nous allons voir que de ce fait découle d'ailleurs le célèbre principe d'incertitude de Heisenberg.

- L'observable quantique associée à la fonction position $q_j(x, \xi) = x_j$ est simplement l'opérateur X_j de multiplication par x_j (il faudrait préciser son domaine : pour $u \in L^2$, $x_j u$ n'est pas toujours dans L^2). La position moyenne de la particule dans l'état $\phi(t, x)$ est définie

par

$$(1.1.17) \quad \langle X_j \rangle_\phi = \langle x_j \phi(t, x), \phi(t, x) \rangle_{L^2} = \int x_j |\phi(t, x)|^2 dx.$$

C'est la moyenne de la fonction q_j pour la mesure $|\phi(t, x)|^2 dx$.

• Conformément à ce que l'on lit pour l'onde plane (1.1.7), l'observable quantique associée à la fonction impulsion $p_j(x, \xi) = \xi_j$ est l'opérateur $\Xi_j = \frac{\hbar}{i} \partial_j$ (encore une fois, attention au domaine). L'impulsion moyenne s'écrit d'ailleurs

$$(1.1.18) \quad \begin{aligned} \langle \Xi_j \rangle_\phi &= \langle \frac{\hbar}{i} \partial_j \phi(t, x), \phi(t, x) \rangle_{L^2} = \int \frac{\hbar}{i} \partial_j \phi(t, x) \overline{\phi(t, x)} dx \\ &= \int \mathcal{F}_h(\frac{\hbar}{i} \partial_j \phi(t, \cdot))(\xi) \overline{\mathcal{F}_h(\phi(t, \cdot))(\xi)} d\xi \\ &= \langle \xi_j \mathcal{F}_h \phi(t, \cdot), \mathcal{F}_h \phi(t, \cdot) \rangle, \end{aligned}$$

où $\mathcal{F}_h$ est la transformation de Fourier semiclassique définie dans $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ par

$$(1.1.19) \quad \mathcal{F}_h u(\xi) = \frac{1}{(2\pi h)^{d/2}} \int e^{-ix \cdot \xi / h} u(x) dx, \quad \mathcal{F}_h^{-1} v(x) = \frac{1}{(2\pi h)^{d/2}} \int e^{ix \cdot \xi / h} v(\xi) d\xi$$

On a utilisé la formule de Parseval, et la relation

$$(1.1.20) \quad \mathcal{F}_h(\frac{\hbar}{i} \partial_j u) = \xi_j \mathcal{F}_h(u)(\xi).$$

Un calcul simple montre que le commutateur $[X_j, \Xi_j] = X_j \Xi_j - \Xi_j X_j$ des observables quantiques de position et d'impulsion est l'opérateur $i\hbar I$, où I est l'identité de $L^2(\mathbb{R}^d)$:

$$(1.1.21) \quad [X_j, \Xi_j] = i\hbar I.$$

Une formulation possible du principe d'incertitude est le résultat suivant :

Lemme 1.1.1 *Soit A_1 et A_2 deux observables quantiques (i.e. deux opérateurs autoadjoints). Soit $u \in L^2$ avec $\|u\|_{L^2} = 1$, et pour $j = 1, 2$, $\delta_j = (\langle A_j^2 \rangle_u - (\langle A_j \rangle_u)^2)^{1/2}$ l'écart-type de l'observable A_j dans l'état u . Si $[A_1, A_2] = i\hbar I$ on a*

$$\delta_1 \delta_2 \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{h}{4\pi}.$$

Preuve: On peut supposer que $\langle A_j \rangle_u = 0$ en considérant les observables $\tilde{A}_j = A_j - \langle A_j \rangle_u I$. On a alors

$$\delta_1^2 \delta_2^2 = \|A_1 u\|^2 \|A_2 u\|^2 \geq |\langle A_1 u, A_2 u \rangle|^2.$$

Puisque A_1 est autoadjoint, on a

$$\begin{aligned}
\langle A_1 u, A_2 u \rangle &= \langle u, A_1 A_2 u \rangle \\
&= \frac{1}{2} \langle u, (A_1 A_2 + A_2 A_1) u \rangle + \frac{1}{2} \langle u, (A_1 A_2 - A_2 A_1) u \rangle \\
&= \frac{1}{2} \langle u, (A_1 A_2 + A_2 A_1) u \rangle + i \frac{\hbar}{2}.
\end{aligned}$$

De plus $(A_1 A_2 + A_2 A_1)$ est symétrique, donc le premier terme du membre de droite est réel, et finalement

$$\delta_1^2 \delta_2^2 \geq |\langle A_1 u, A_2 u \rangle|^2 = \frac{1}{4} \langle u, (A_1 A_2 + A_2 A_1) u \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4} \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

□

L'inégalité ci-dessus s'applique aux opérateurs X_j et Ξ_j de position et d'impulsion : on verra plus loin qu'il s'agit bien d'opérateurs autoadjoints. Pour ces opérateurs, on utilisera le principe d'incertitude plutôt sous la forme suivante (plus mathématique disons). Pour $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ on a

$$(1.1.22) \quad \frac{\hbar}{2} \|u\|_{L^2}^2 \leq \|x_j u\| \|\hbar D_j u\|.$$

L'inégalité (1.1.22) s'obtient d'ailleurs directement en calculant $\|\lambda x_j u + \hbar \partial_j u\|^2$ pour $\lambda \in \mathbb{R}$, et en remarquant que ce trinôme du second degré en λ a un signe constant. Le rôle principal est encore joué par la relation $[X_j, \Xi_j] = i\hbar I$. Signalons enfin une autre écriture possible de (1.1.22), plus proche de celle donnée par le Lemme 1.1.1 : pour $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, écrivant (1.1.20) pour la fonction $v(x) = e^{i\xi_0 \cdot x} u(x + x_0)$ et en utilisant le fait que la transformée de Fourier semiclassique est une isométrie de $L^2(\mathbb{R}^d)$, on a

$$(1.1.23) \quad \frac{\hbar}{2} \|u\|_{L^2}^2 \leq \|(x - x_0)_j u\| \|(\xi - \xi_0)_j \mathcal{F}_h u\|.$$

Références pour cette section : [18], [21], [4], [20], [23]...

1.2 L'oscillateur harmonique

Avec le laplacien ($V = 0$), l'opérateur de Schrödinger le plus simple et le plus célèbre est l'oscillateur harmonique. Il s'agit de l'opérateur $P_{osc}(x, \hbar D) = (\hbar D)^2 + V(x)$, où

$$(1.2.1) \quad V(x) = \sum_{j=1}^d \mu_j x_j^2 \text{ avec } \mu_j > 0 \text{ pour tout } j = 1 \dots d.$$

Il sert souvent de modèle qualitatif mais aussi quantitatif dans des situations plus délicates. On rappelle d'abord rapidement quelques résultats très faciles sur le spectre de P_{osc} qui font partie de la boîte à outils semiclassique (cf. [11],...).

1.2.1 Valeurs propres de l'oscillateur harmonique

On met de côté pour l'instant la question du domaine de l'opérateur P_{osc} sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, et l'on commence par chercher ses valeurs propres, i.e. les $E \in \mathbb{R}$ pour lesquels $\text{Ker}(P_{osc} - E) \neq \{0\}$ dans L^2 .

On procède par séparation des variables : étant donnée la forme particulière du potentiel, on peut chercher des solutions de l'équation $Pu = Eu$ qui sont à variables séparées, i.e. qui s'écrivent $u(x_1, x_2, \dots, x_d) = u_1(x_1)u_2(x_2) \dots u_d(x_d)$. On obtient un système diagonal d'équations différentielles pour les u_j :

$$(1.2.2) \quad -h^2 \partial_j^2 u_j + \mu_j x_j^2 u_j = E_j u_j,$$

où les E_j doivent avoir pour somme E . On considère dans un premier temps chacune de ces équations séparément, ou encore l'équation

$$(1.2.3) \quad P_{h,\mu} u = Eu, \quad P_{h,\mu} = -h^2 \partial_x^2 + \mu x^2.$$

Le changement de variable $y(x) = \mu^{1/4} \frac{x}{\sqrt{h}}$ transforme d'ailleurs cette équation en

$$(1.2.4) \quad -v''(y) + y^2 v(y) = \frac{E}{\hbar \sqrt{\mu}} v(y),$$

où $v(y) = u(x)$. On étudie donc l'opérateur différentiel Q sur $\mathbb{R}$ défini par

$$(1.2.5) \quad Q(x, hD) = D^2 + x^2,$$

et l'équation aux valeurs propres associée :

$$(1.2.6) \quad Qu = Eu.$$

On peut bien sûr résoudre cette équation avec des méthodes élémentaires : c'est l'objet de l'Exercice 1.2.2 ci-dessous. Nous allons utiliser plutôt les deux remarques suivantes :

- Pour $u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$, on a $\langle Qu, u \rangle \in \mathbb{R}$ et même $\langle Qu, u \rangle \geq \|u\|_{L^2}^2$. En effet en intégrant par parties, on obtient

$$(1.2.7) \quad \langle Qu, u \rangle = \int (D^2 + x^2) u(x) \bar{u}(x) dx = \|Du\|^2 + \|xu\|^2 \geq 2\|Du\| \|xu\| \geq \|u\|^2,$$

où la dernière inégalité n'est autre que le principe d'incertitude. Au passage on note que $\langle Qu, u \rangle = \langle u, Qu \rangle$ pour $u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$: on dit que Q est un opérateur symétrique.

En utilisant la densité de $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ dans L^2 , on en déduit que si $u \in L^2(\mathbb{R})$ est solution de (1.2.6) avec $\|u\| = 1$, on a nécessairement $E \in [1, +\infty[$. Notons que cette propriété n'est vraie que pour les éléments u de L^2 qui s'écrivent comme limite de suites (u_n) de $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$

telles que $Qu_n \rightarrow Qu$ dans L^2 (voir plus loin la discussion sur le domaine de l'opérateur non-borné P_{osc}).

• On peut écrire $Q = L^+L^- + 1$, et même $Q = \frac{1}{2}(L^+L^- + L^-L^+)$, où L^+ et L^- sont les opérateurs de création et d'annihilation respectivement :

$$(1.2.8) \quad L^+ = -\partial_x + x, \quad L^- = \partial_x + x.$$

La première relation s'obtient facilement, et la deuxième est liée encore une fois au principe d'incertitude à travers (1.1.21) : $\frac{1}{2}(L^-L^+ - L^+L^-) = 1$. Remarquons aussi que $L^- = (L^+)^*$, et que de ce fait $\langle \phi, L^+L^- \phi \rangle = \|L^- \phi\|^2 \geq 0$. On retrouve donc l'inégalité $\langle Qu, u \rangle \geq \|u\|^2$.

Supposons maintenant que $u_E \in L^2$ soit un vecteur propre normalisé ($\|u_E\|_{L^2} = 1$) de l'opérateur L^+L^- pour la valeur propre $E \geq 0$, i.e. $L^+L^-u_E = Eu_E$. On a alors

$$(1.2.9) \quad EL^-u_E = L^-(L^+L^-)u_E = (L^-L^+)L^-u_E = (L^+L^- + 2)L^-u_E,$$

ce qui montre que L^-u_E est un vecteur propre de L^+L^- pour la valeur propre $E - 2$, sauf si $L^-u_E = 0$. On a d'ailleurs $\|L^-u_E\|^2 = \langle u_E, L^+L^-u_E \rangle = E$.

Au total, L^+L^- ne peut pas avoir de valeur propre qui n'est pas un entier pair, sinon $(L^-)^n u_E$ serait pour n assez grand une fonction propre correspondant à une valeur propre négative. On peut renverser l'argument : l'équation $L^-u_0 = 0$ admet une unique solution dans L^2 , qui est

$$(1.2.10) \quad u_0(x) = \pi^{-1/4} e^{-x^2/2}.$$

Du coup u_0 est un vecteur propre de L^+L^- pour la valeur propre 0. Ensuite $\tilde{u}_2 = L^+u_0$ est un vecteur propre associé à la valeur propre 2, dont la norme vérifie

$$\|\tilde{u}_2\|^2 = \langle L^+u_0, L^+u_0 \rangle = \langle u_0, L^-L^+u_0 \rangle = \langle u_0, (L^+L^- + 2)u_0 \rangle = 2.$$

On obtient donc un vecteur propre normalisé en posant $u_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}L^+u_0$. Par récurrence, on conclut que l'ensemble des valeurs propres de L^+L^- est $2\mathbb{N}$, et que la fonction propre normalisée associée à $E = 2n$ est

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{2n(2n-2)(2n-4)\dots 2}}(L^+)^n u_0 = \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}\pi^{1/4}}(L^+)^n(e^{-x^2/2}).$$

Finalement, puisque $Q = L^+L^- + 1$, le spectre ponctuel (i.e. l'ensemble des valeurs propres) de l'opérateur Q est l'ensemble $2\mathbb{N} + 1$, et u_n est la fonction propre associée à $E = 2n + 1$.

Revenons au cas général. Le spectre ponctuel de l'opérateur $P_{h,\mu}$ est donc l'ensemble $\sigma_p = \{(2n+1)\hbar\sqrt{\mu}, n \in \mathbb{N}\}$, et la fonction propre associée à $E = (2n+1)\hbar\sqrt{\mu}$ est la fonction

$$\psi_n(x) = C_n(\hbar)u_n(\mu^{1/4}\frac{x}{\sqrt{\hbar}}),$$

où $C_n(\hbar) = h^{-1/4} \mu^{1/8}$ est choisie pour que $\|\psi_n\| = 1$. On voit facilement que ψ_n s'écrit aussi

$$(1.2.11) \quad \psi_n(x) = h^{-1/4} \mu^{1/8} H_n(\mu^{1/4} \frac{x}{\sqrt{\hbar}}) e^{-\sqrt{\mu} x^2 / 2\hbar},$$

où H_n est un polynôme de degré n . Les H_n sont les polynômes de Hermite, et sont donnés par la relation

$$H_n(x) = e^{x^2/2} (x - \partial_x)^n (e^{-x^2/2}) = (-1)^n e^{x^2/2} \partial_x^n (e^{-x^2/2}).$$

On note le

Lemme 1.2.1 *L'espace vectoriel $\mathcal{H}_0$ engendré par les ψ_n est dense dans $L^2(\mathbb{R})$.*

Preuve: $\mathcal{H}_0$ est aussi engendré par $\mathcal{D} = \{x \mapsto x^k e^{-x^2/2}, k \in \mathbb{N}\}$. Or si $\psi \in \mathcal{D}^\perp$, on a pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout $\xi \in \mathbb{R}$,

$$\int \sum_{k=0}^n \frac{(-i\xi x)^k}{k!} e^{-x^2/2} \bar{\psi}(x) dx = 0,$$

et donc, par convergence dominée, $\mathcal{F}_{\hbar, x \rightarrow \xi}(e^{-x^2/2} \bar{\psi}(x)) = 0$ d'où $\psi = 0$. $\square$

On considère enfin l'oscillateur harmonique P_{osc} dans $\mathbb{R}^d$ défini par (1.2.1). Ce qui précède permet de montrer d'abord que le spectre discret de P_{osc} contient l'ensemble

$$\sigma(P_{osc}) = \{\lambda(\alpha) = \sum_{j=1}^d \sqrt{\mu_j} (2\alpha_j + 1) \hbar, \alpha \in \mathbb{N}^d\},$$

et que la fonction propre associée à $\lambda(\alpha)$ est

$$u_\alpha(x, \hbar) = \hbar^{-d/4} (\mu_1 \dots \mu_d)^{1/8} H_n(\mu^{1/4} \frac{x_1}{\sqrt{\hbar}}) \dots H_n(\mu^{1/4} \frac{x_d}{\sqrt{\hbar}}) e^{-\sum_{j=1}^d \sqrt{\mu_j} x_j^2 / 2\hbar}$$

Il reste à montrer que P_{osc} n'a pas d'autre valeur propre : c'est une conséquence du fait que les u_α forment une partie dense de $L^2(\mathbb{R}^d)$ (on a vu que c'est le cas en dimension 1, et le produit tensoriel $L^2(\mathbb{R}) \otimes \dots \otimes L^2(\mathbb{R})$ est dense dans $L^2(\mathbb{R}^d)$). Finalement le spectre discret de P_{osc} est bien l'ensemble $\sigma(P_{osc})$ ci-dessus.

On montrera plus loin (cf. Section 1.4) que l'on a déterminé en fait tout le spectre de l'oscillateur harmonique.

Exercice 1.2.2 *On s'intéresse à l'équation différentielle*

$$(E_\lambda) \quad -y'' + x^2 y = \lambda y$$

où λ est un paramètre réel.

1. On suppose dans cette question que $\lambda = 1$.
 - (a) Montrer que

$$(-\partial_x + x)(\partial_x + x)y = -y'' + (x^2 - 1)y$$
 - (b) Résoudre l'équation $-z' + xz = 0$, et en déduire l'expression générale des solutions de (E_1) .
2. On cherche une solution de (E_λ) sous la forme $y(x) = e^{-x^2/2}u(x)$.
 - (a) Montrer que u doit vérifier l'équation de Hermite

$$(H_\lambda) \quad u'' - 2xu + (\lambda - 1)u = 0$$
 - (b) On cherche une solution de (H_λ) sous forme de série entière $u(x) = \sum_{n \geq 0} a_n x^n$. Quelle relation de récurrence doivent vérifier les a_n ?
 - (c) On note maintenant $(a_n^\pm)$ les suites vérifiant la relation de récurrence ci-dessus et $a_0^+ = 1$, $a_1^+ = 0$, et $a_0^- = 0$, $a_1^- = 1$. Que se passe-t-il quand $\lambda = 2q + 1$ pour un certain $q \in \mathbb{N}$? Montrer dans tous les cas que les séries entières correspondantes ont un rayon de convergence infini. On note u_+ et u_- les fonctions qu'elle définissent.
3. On suppose ici que $\lambda \notin 2\mathbb{N} + 1$. On va montrer que les solutions non-triviales de (E_λ) ne sont pas bornées à l'infini, et pour cela comparer les solutions de (H_λ) à $g_\alpha(x) = e^{\alpha x^2/2}$ pour un $\alpha \in \mathbb{R}^+$ bien choisi.
 - (a) Montrer que (u_+, u_-) est une base de l'espace des solutions de (H_λ) .
 - (b) On travaille avec $u_+ : x \mapsto \sum_{n \geq 0} a_{2n} x^{2n}$. Notant b_n les coefficients du développement en série entière de $g_\alpha(x)$, montrer que si $\alpha < 2$, il existe un entier $N > 0$ tel que, pour tout $n \geq N$, $\frac{a_{2n}}{a_{2n+2}} < \frac{b_{2n}}{b_{2n+2}}$.
 - (c) Montrer alors que l'on peut supposer que les a_{2n} sont tous positifs et que l'on a dans ce cas

$$u_+(x) - \sum_{n=0}^N a_{2n} x^{2n} \geq g_\alpha(x) - \sum_{n=0}^N b_{2n} x^{2n},$$
 puis que $g_\alpha(x) = O(u_+(x))$.
 - (d) Montrer enfin qu'aucune solution de (E_λ) n'est bornée sur $\mathbb{R}$.
4. On suppose maintenant que $\lambda = 2q + 1$, $q \in \mathbb{N}$.
 - (a) Montrer que u_+ (resp. u_-) tend vers 0 quand x tend vers $\pm\infty$ si q est pair (resp. est impair). Quel est le comportement de l'autre solution (u_- ou u_+) à l'infini ?
 - (b) On note P_q la solution polynomiale de (H_{2q+1}) , normalisée de sorte que le coefficient du terme dominant soit 2^q , et H_q la solution correspondante $H_q(x) = e^{-x^2/2}P_q(x)$ de (E_{2q+1}) (fonction de Hermite). Montrer qu'il existe une constante C_q telle que

$$H_q(x) = C_q(-\partial_x + x)H_{q-1}(x)$$

Calculer quelques uns des P_q et comparer la courbe représentative des H_q correspondants avec celle de V .

1.2.2 Approximation harmonique

L'analyse du spectre de l'oscillateur harmonique est en soi intéressante... mais on va montrer aussi que le spectre d'opérateurs plus généraux peut se déduire de l'étude que l'on vient de faire. On considère l'opérateur de Schrödinger P défini par

$$(1.2.12) \quad P(x, hD) = -h^2 \Delta + V(x),$$

avec un potentiel V qui vérifie les hypothèses suivantes

(H1) $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $\liminf_{|x| \rightarrow \infty} V(x) > 0$.

(H2) V admet un minimum non-dégénéré en 0, i.e. $\nabla V(0) = 0$, $\nabla^2 V(0) > 0$.

On va montrer que l'opérateur P admet une valeur propre proche de l'état fondamental (i.e. la plus petite valeur propre) de l'opérateur P_0 , que l'on obtient en remplaçant V par son polynôme de Taylor à l'ordre 2 en 0 :

$$(1.2.13) \quad P_0(x, hD) = (hD)^2 + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 V(0)x, x \rangle.$$

Quitte à changer de variables, on peut considérer que P_0 est un oscillateur harmonique. Il existe en effet une matrice orthogonale G telle que $\nabla^2 V(0) = GQG^*$, où Q est une matrice diagonale qu'on écrit $Q = 2 \operatorname{diag}(\mu_1, \dots, \mu_d)$, et le changement de variable $y = Mx$ transforme l'opérateur P_0 en l'oscillateur harmonique P_{osc} étudié plus haut. On supposera donc que $\nabla^2 V(0) = 2 \operatorname{diag}(\mu_1, \dots, \mu_d)$.

Soit $\chi \in \mathcal{C}_0^\infty(]-1, 1[)$ telle que $\mathbf{1}_{[-1/2, 1/2]} \prec \chi \leq 1$. On utilise la notation $\phi_1 \prec \phi_2$ lorsque ϕ_2 vaut 1 sur le support de ϕ_1 . On pose

$$u(x, h) = \chi\left(\frac{\phi_0(x)}{\epsilon}\right) u_0(x, h),$$

où u_0 est l'état fondamental (i.e. la première fonction propre) de l'oscillateur harmonique :

$$u_0(x, h) = C_0 \hbar^{-d/4} e^{-\phi_0(x)/h}, \quad \phi_0(x) = \sum_{j=1}^d \sqrt{\mu_j} x_j^2.$$

On va montrer que la fonction u ainsi définie est une fonction propre approchée (on dit aussi quasi-mode) de l'opérateur P , dans le sens où même si elle n'est pas nulle, la norme L^2 de $(P - \lambda_0)u$ est petite (λ_0 est la première valeur propre de P_0). En effet

$$Pu = \chi\left(\frac{\phi_0(x)}{\epsilon}\right) Pu_0 + [P, \chi_\epsilon] u_0 = \lambda_0 u + \chi_\epsilon (P - P_0) u_0 + [P, \chi_\epsilon] u_0,$$

où l'on a noté $\chi_\epsilon(x) = \chi\left(\frac{\phi_0(x)}{\epsilon}\right)$ et

$$[P, \chi_\epsilon] u_0 = (P \chi_\epsilon - \chi_\epsilon P) u_0 = -h^2 \Delta(\chi_\epsilon) u_0 - h \nabla \chi_\epsilon \cdot h \nabla u_0.$$

On note d'abord que sur le support de $\nabla\chi_\epsilon$ et de $\Delta\chi_\epsilon$ on a $\epsilon/2 \leq |\phi_0(x)| \leq \epsilon$. Par conséquent on a

$$\|[P, \chi_\epsilon]u_0\|_{L^2} \leq Ce^{-\epsilon/4\hbar}\|u_0\|.$$

Puisque $P - P_0 = V(x) - \frac{1}{2}\langle \nabla^2 V(0)x, x \rangle = O(|x|^3)$, il reste à estimer

$$I(\hbar) = \hbar^{-d/2} \int (|x|^3 \chi_\epsilon(x) e^{-\phi_0(x)/\hbar})^2 dx \leq \hbar^3 \int |y|^6 e^{-2\phi_0(y)} dy,$$

ce qui donne

$$\|(P - P_0)u_0\|_{L^2} = O(\hbar^{3/2})\|u_0\|.$$

Finalement, compte tenu aussi du fait que $\|u\| = (1 + O(e^{-\epsilon/\hbar}))\|u_0\|$, on obtient

$$\|(P - \lambda_0)u\|_{L^2} = O(\hbar^{3/2})\|u\|.$$

Maintenant on utilise une conséquence du théorème spectral (cf. Proposition 1.4.23). Pour un opérateur autoadjoint P on a, pour tout u dans le domaine de P ,

$$\text{dist}(z, \sigma(P))\|u\| \leq \|(P - z)u\|.$$

Notons aussi que lorsque l'hypothèse (H1) est vérifiée, le spectre de P est discret dans un voisinage de 0. On a donc la

Proposition 1.2.3 *On suppose que les hypothèses (H1) et (H2) sont vérifiées. Pour tout $C > 0$, il existe $h_0 > 0$ tel que, pour tout $h \in]0, h_0]$, l'opérateur $P = -\hbar^2\Delta + V$ admet une valeur propre dans l'intervalle $]\lambda_0 - Ch^{3/2}, \lambda_0 + Ch^{3/2}[$.*

En particulier, on a obtenu une borne supérieure pour la plus petite valeur propre $\lambda_0(P)$ de P :

$$\lambda_0(P) \leq \lambda_0 + Ch^{3/2}.$$

Une stratégie possible pour obtenir une minoration consiste à interchanger les rôles de P et de P_{osc} dans le raisonnement précédent. L'ingrédient essentiel dans ce qui précède est le caractère exponentiellement décroissant de la fonction propre de P_{osc} . Autrement dit, pour obtenir une minoration de $\lambda_0(P)$, il faudrait montrer d'abord que la fonction propre correspondante est elle aussi bien localisée. Ce genre de résultats s'obtient à l'aide d'estimations appelées estimations d'Agmon, et que l'on verra plus loin dans ce cours.

Références pour cette section : [11], [7].

1.3 Diffusion quantique et résonances en dimension 1

On s'intéresse maintenant à l'équation de Schrödinger stationnaire dans le cas où le potentiel, qu'on supposera régulier, tend vers 0 à l'infini. On considère ici seulement le cas de la dimension 1, où les objets sont très simples. On verra plus loin dans ce cours comment tout cela se généralise.

Supposons qu'une particule classique soit lancée depuis $-\infty$: ou bien son énergie E est supérieure au maximum V_0 de V , et elle continue jusqu'à $+\infty$, ou bien $E < V_0$ et la particule est renvoyée vers $-\infty$. Dans le premier cas on dit que la particule est transmise, et qu'elle est réfléchie dans le second cas. Notons aussi que si $E = V_0$, la particule classique atteint un point d'équilibre instable.

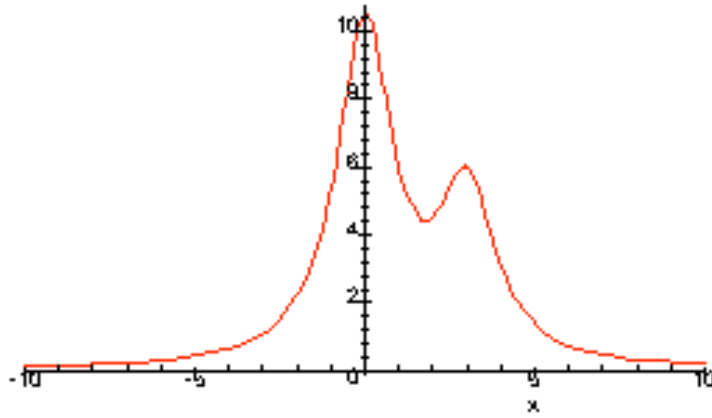


FIG. 1.1 – Exemple de potentiel en dimension 1

Nous allons voir que dans le cas quantique, la situation est nettement plus intéressante.

1.3.1 Solutions de Jost et Matrice de diffusion

Solutions de Jost

On considère l'opérateur différentiel $P = h^2 D^2 + V(x)$ sur $\mathbb{R}$, où le potentiel V est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ à support compact pour simplifier. Soit $E \in \mathbb{R}_+^*$. En dehors du support de V , toutes les solutions de l'équation

$$(1.3.1) \quad Pu = Eu$$

s'écrivent sous la forme

$$(1.3.2) \quad u(x, E, h) = \alpha_+(E, h)e^{i\sqrt{E}x/h} + \alpha_-(E, h)e^{-i\sqrt{E}x/h}$$

pour certaines constantes $\alpha_{\pm} \in \mathbb{C}$ qui déterminent entièrement la solution u .

Définition 1.3.1 On appelle solutions de Jost à droite chacune des solutions $J_d^{\pm}$ de l'équation $Pu = Eu$ définies par la relation (1.3.2) avec $\alpha_{\pm}(E, h) = 1, \alpha_{\mp}(E, h) = 0$ pour $x \gg 0$. On appelle solutions de Jost à gauche chacune des solutions $J_g^{\pm}$ de l'équation $Pu = Eu$ définies par la relation (1.3.2) avec $\alpha_{\pm}(E, h) = 1, \alpha_{\mp}(E, h) = 0$ pour $x \ll 0$.

Remarque 1.3.2 Les solutions de Jost ne sont pas dans L^2 pour $E \in \mathbb{R}^+$ (c'est une remarque importante !), donc l'interprétation en termes de particule quantique peut paraître hasardeuse. On peut cependant s'y raccrocher en considérant des paquets d'ondes gaussiens comme expliqué plus haut.

Puisque le wronskien $W(u, v) = u'v - uv'$ de J_g^+ et J_g^- , qui est constant, vaut $2i\sqrt{E}/h \neq 0$, (J_g^+, J_g^-) est une base de l'espace des solutions de (1.3.1). C'est le cas aussi de (J_d^+, J_d^-) , et on note $\mathcal{T}(E, h)$ la matrice de $\mathcal{M}_2(\mathbb{C})$, appelée matrice de transmission, définie par

$$(1.3.3) \quad \begin{pmatrix} J_g^+ \\ J_g^- \end{pmatrix} = \mathcal{T}(E, h) \begin{pmatrix} J_d^+ \\ J_d^- \end{pmatrix}.$$

En remarquant que $(J_{g,d}^+)^* = J_{g,d}^-$, on voit que la matrice $\mathcal{T}$ s'écrit

$$(1.3.4) \quad \mathcal{T}(E, h) = \begin{pmatrix} t(E, h) & r(E, h) \\ r^*(E, h) & t^*(E, h) \end{pmatrix}.$$

Ici on a utilisé la notation $f^*(x, E, h) = \overline{f(\bar{x}, \bar{E}, \bar{h})}$, et on doit noter que dans le cas où f est une fonction holomorphe de x et E , f^* l'est aussi. Enfin puisque les wronskiens de J_g^+, J_g^- et de J_d^+, J_d^- sont égaux, on trouve

$$(1.3.5) \quad \det \mathcal{T}(E, h) = t(E, h)t^*(E, h) - r(E, h)r^*(E, h) = 1.$$

Pour E réel, on obtient bien sûr $|t(E, h)|^2 - |r(E, h)|^2 = 1$, ce qui entraîne en particulier que $t(E, h)$ et $t^*(E, h)$ ne s'annulent pas pour $E \in \mathbb{R}_+^*$.

Matrice de diffusion

On peut classer les solutions de Jost différemment, en fonction de la direction de leur vecteur d'onde (cf. la description de l'onde plane). Les fonctions J_g^+ et J_d^- sont entrantes : elles se dirigent vers la zone d'action du potentiel (là où $V \neq 0$), et J_d^+ et J_g^- sont sortantes. L'idée derrière la notion de diffusion est de relier les données sortantes aux données entrantes. L'objet mathématique correspondant est la matrice de diffusion :

Définition 1.3.3 On appelle matrice de diffusion (en anglais scattering) à énergie E la matrice de $\mathcal{M}_2(\mathbb{C})$ définie par

$$\mathcal{S}(E, h) = \frac{1}{t^*(E, h)} \begin{pmatrix} 1 & -r^*(E, h) \\ r(E, h) & 1 \end{pmatrix}.$$

La relation (1.3.5) donne immédiatement

$$(1.3.6) \quad \det \mathcal{S}(E, h) = \frac{t(E, h)}{t^*(E, h)}.$$

Toujours pour $E \in \mathbb{R}_*^+$, la matrice $\mathcal{S}(E, h)$ est donc unitaire, et son déterminant est un nombre complexe de module 1, que l'on écrit

$$(1.3.7) \quad \det \mathcal{S}(E, h) = e^{2i\Theta(E, h)}, \quad \Theta(E, h) = -\arg(t^*(E, h)),$$

où la fonction $\Theta(E, h)$ est appelée phase de diffusion.

Remarque 1.3.4 Un calcul simple permet de montrer que si une solution u de l'équation (1.3.1) s'écrit

$$u = \beta_+ J_g^+ + \beta_- J_d^- = \gamma_+ J_d^+ + \gamma_- J_g^-,$$

alors

$$(1.3.8) \quad \begin{pmatrix} \gamma_+ \\ \gamma_- \end{pmatrix} = \mathcal{S}(E, h) \begin{pmatrix} \beta_+ \\ \beta_- \end{pmatrix}.$$

Autrement dit si les solutions entrantes (J_g^+, J_d^-) forment une base de l'espace des solutions, les solutions sortantes (J_d^+, J_g^-) aussi, et $\mathcal{S}(E, h)$ est la matrice de passage de la base entrante à la base sortante, ce qui correspond à ce que nous avons annoncé avant la Définition 1.3.3.

On appelle coefficient de transmission et de réflexion respectivement les quantités

$$T(E, h) = |s_{11}(E, h)|^2 = \frac{1}{|t^*(E, h)|^2}, \quad \text{et } R(E, h) = |s_{21}(E, h)|^2 = \frac{|r(E, h)|^2}{|t^*(E, h)|^2}.$$

La relation (1.3.5) donne encore $R + T = 1$. Les nombres R et T sont interprétés comme la probabilité pour une particule rentrante par la gauche d'être réfléchi ou transmise par la barrière de potentiel, compte tenu de la relation :

$$1.J_g^+ = s_{11}J_d^+ + s_{21}J_g^-.$$

Disons un mot de la phase de diffusion (on n'y reviendra pas dans ce cours). Le théorème de Birman-Krein permet de relier cette quantité à une autre dont la compréhension est

immédiate : la fonction de comptage pour les valeurs propres : c'est la fonction $\mathcal{N}$ définie sur $\mathbb{R}$ par

$$\mathcal{N}(\lambda) = \#\{E \in \sigma(P), E \leq \lambda\},$$

où $P = -h^2\Delta + V(x)$. Disons que si $V(x) \rightarrow 0$ quand $|x| \rightarrow \infty$, alors le spectre de P dans $\mathbb{R}_*^*$ est discret, et la fonction $\mathcal{N}$ est bien définie sur $\mathbb{R}_*^*$. Le lien entre cette fonction et la phase de diffusion passe par la fonction de décalage spectral (Spectral Shift Function ou SSF en anglais). Il s'agit de la distribution tempérée définie, disons quand $V(x)$ tend vers 0 suffisamment vite à l'infini, par $\xi(E, h) = 0$ pour $E \ll 0$, et, pour $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$,

$$(1.3.9) \quad \langle \xi', f \rangle = \text{Tr}(f(P(x, hD)) - f(h^2D^2)).$$

Le théorème de Birman-Krein dit que, pour $E > 0$,

$$(1.3.10) \quad \theta(E, h) = \pi \xi(E, h) \pmod{\pi \mathbb{Z}},$$

D'autre part, la fonction ξ peut être vue comme une extension au spectre continu de la fonction $\mathcal{N}$. En effet pour $E < 0$, on a

$$(1.3.11) \quad \mathcal{N}(E, h) = \xi(E, h),$$

ce qui donne le lien annoncé entre Θ et $\mathcal{N}$.

1.3.2 Dilatation analytique et résonances

On suppose maintenant que le potentiel V s'étend en une fonction holomorphe dans le secteur Ω du plan complexe défini par

$$\Omega = \{x \in \mathbb{C}, |\text{Im } x| \leq \delta \langle \text{Re } x \rangle\},$$

pour un $\delta > 0$, où l'on a noté $\langle x \rangle = (1 + |x|^2)^{1/2}$. Bien sûr, on ne peut plus se contenter de potentiel V à support compact sur $\mathbb{R}$. On suppose que, pour un $\rho > 1$,

$$V(x) = O(\langle x \rangle^{-\rho}) \text{ dans } \Omega.$$

La terminologie habituelle est de dire que V est un potentiel à courte portée (il serait dit à longue portée si l'on supposait seulement $\rho > 0$).

Puisque V est analytique dans Ω , les solutions de l'équation $Pu = Eu$ sont holomorphes dans Ω . Sous l'hypothèse de courte portée, on peut toujours définir des solutions de Jost : la Définition 1.3.1 doit être remplacée par

$$J_g^\pm \sim e^{\pm i\sqrt{E}x/h}, \text{ quand } \text{Re } x \rightarrow -\infty, \text{ et } J_d^\pm \sim e^{\pm i\sqrt{E}x/h}, \text{ quand } \text{Re } x \rightarrow +\infty.$$

Le fait important est que si z varie sur la droite complexe $\mathbb{R}e^{i\theta}$, avec $\theta > 0$ assez petit pour que cette droite soit dans Ω , alors la solution sortante $J_d^+(z)$ (resp. $J_g^-(z)$) appartient

à $L^2(\mathbb{R}_x^+)$ (resp. $L^2(\mathbb{R}_x^-)$) avec $z = xe^{i\theta}$, alors que les solution entrantes ne sont pas L^2 . Mieux, ce fait est encore vrai pour $E \in \mathbb{C}$ avec $0 > \arg E > -2\theta$. Il suffit en effet de noter que

$$\operatorname{Re}(|E|^{1/2}e^{i\theta E/2}xe^{i\theta}) = |E|^{1/2}x \sin(\frac{\theta E}{2} + \theta).$$

Pour $\mu \in \mathbb{R}$ et $\phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$, on pose $U_\mu \phi(x) = e^{\mu/2} \phi(xe^\theta)$. U_μ s'étend en un opérateur unitaire sur $L^2(\mathbb{R})$, avec $U_\mu^* = U_{-\mu}$, et on note que

$$U_\mu P(x, hD) U_\mu^* = e^{-2\mu} (hD)^2 + V(e^\mu x).$$

Les coefficients de l'opérateur différentiel qui apparait au second membre admettent un prolongement analytique en μ pour $|\mu|$ assez petit. On note P_θ le prolongement obtenu pour $\mu = i\theta$ avec $0 < \theta < \theta_0$.

Le théorème de Weyl permet d'affirmer que le spectre essentiel de P_θ est

$$\sigma_{ess}(P_\theta) = \sigma_{ess}(e^{-2i\theta} (hD)^2) = e^{-2i\theta} \mathbb{R}^+.$$

Définition 1.3.5 Soit $E \in \mathbb{C}$ avec $-2\theta_0 < \arg(E) \leq 0$. On dit que E est une résonance de P s'il existe $\theta \in]0, \theta_0[$ tel que $\arg(E) > -2\theta$ et $E \in \sigma_{disc}(P_\theta)$. L'ensemble des résonances de P est noté $\Gamma(h)$.

Voici pour terminer le lien entre la matrice de diffusion et les résonances de P :

Proposition 1.3.6 Soit $E \in \mathbb{C}$, avec $-2\theta_0 < \arg E < 0$. Les assertions suivantes sont équivalentes :

1. $E \in \Gamma(h)$.
2. L'équation $Pu = Eu$ admet une solution purement sortante, i.e. J_d^+ et J_g^- sont proportionnelles.
3. E est un pôle de la matrice de diffusion, i.e. $t^*(E, h) = 0$.

Supposons pour finir que E est une résonance de P , et notons $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ la fonction résonante correspondante, i.e. la fonction vérifiant $P_\theta u = Eu$ pour un certain θ , et qu'on suppose normalisée : $\|u\|_{L^2} = 1$. Alors $\phi(t, x) = e^{-itE/h} u(x)$ appartient à L^2 pour tout t , mais

$$\|\phi(t, x)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = e^{-t \operatorname{Im} E/h}.$$

Autrement dit l'énergie associée à ϕ décroît au cours du temps. Physiquement, on dit que cette fonction ϕ correspond à une pseudo-particule de durée de vie $1/\operatorname{Im} E$. En particulier, on s'attend à ce que les résonances proches de l'axe réel correspondent à des phénomènes physiques observables.

1.3.3 Quelques exemples

On peut trouver dans les livres de mécanique quantique (par exemple [7], [4], [18]...) plusieurs exemples de calculs explicites de matrice de diffusion et de coefficients de transmission. Bien sûr il s'agit à chaque fois de potentiels très particuliers, pour lesquels les solutions de l'équation de Schrödinger $Pu = Eu$ sont connus à peu près explicitement, disons en termes de fonctions spéciales. On peut trouver des calculs explicites pour un potentiel général dans [22], [8], [9].

Un exemple calculable : la barrière carrée

On considère le potentiel V défini par

$$(1.3.12) \quad V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \notin [0, \ell], \\ V_0 & \text{si } x \in [0, \ell]. \end{cases}$$

On prend $E > V_0$. Le potentiel n'est pas régulier, et il n'y a pas de raison à priori que les solutions de l'équation $Pu = Eu$ le soient. On pourrait chercher les solutions distributions de cette équation (**Exercice !**), mais l'on va se contenter des solutions dans $H^2(\mathbb{R})$, le domaine de l'opérateur de Schrödinger correspondant. On résout d'abord l'équation sur $] -\infty, 0[$, $]0, \ell[$ puis $]\ell, +\infty[$, et l'on note que $H^2(\mathbb{R}) \subset C^1(\mathbb{R})$ (mais n'est pas inclus dans $C^2(\mathbb{R})$). On écrit alors les conditions de recollement en 0 et en ℓ pour la solution et sa dérivée.

Tous calculs faits (**Exercice !**), on trouve l'expression suivante pour le coefficient de transmission :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(\frac{\sqrt{E-V_0}}{h})}.$$

Phase de diffusion pour le chameau

Pour illustrer ce qui précède, on reprend sans détails des résultats de [9] pour un potentiel correspondant à la Figure 1.2, présentant deux maximums de même niveau V_0 (supposés non-dégénérés).

Le calcul de la (dérivée de la) phase de diffusion pour E réel proche de V_0 donne la courbe représentative de la Figure 1.3.

On note des oscillations, sous la forme de pics d'abord très étroits pour $E \ll V_0$, puis qui s'amortissent quand E devient supérieur à V_0 . Les pics correspondent à l'existence de résonances dont la partie réelle est l'énergie pour laquelle le maximum a lieu. Plus les résonances sont proches de l'axe réel, et plus le pic est haut et étroit. Pour $E \ll V_0$, on est dans la configuration du puits dans l'île (on parle aussi de résonances de forme), et l'on verra que les résonances correspondantes sont exponentiellement proches de l'axe réel.

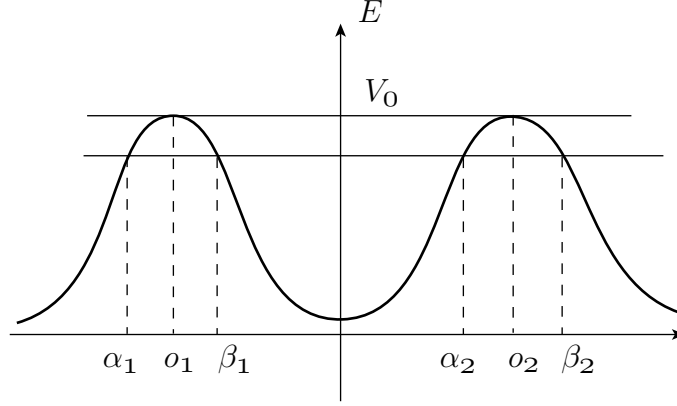


FIG. 1.2 – Le chameau : potentiel

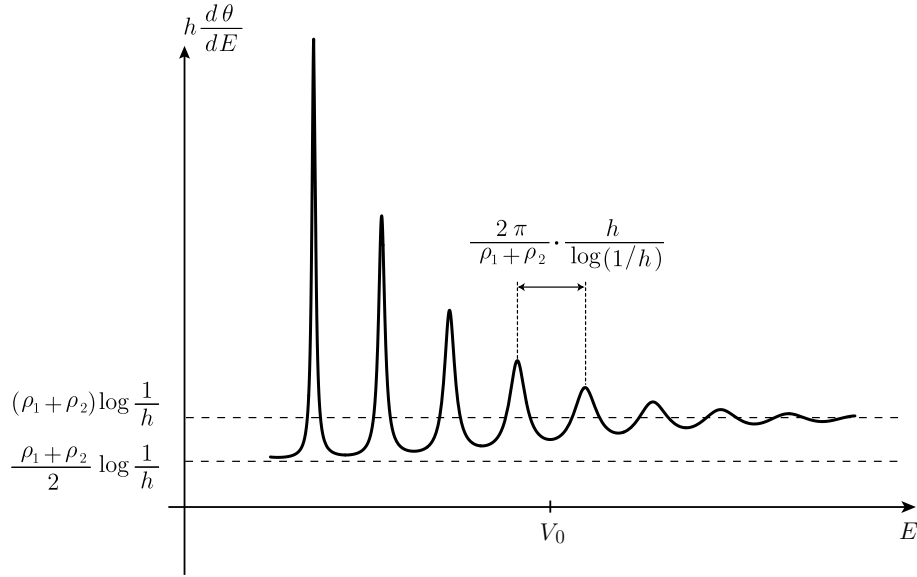


FIG. 1.3 – Le chameau : dérivée de la phase de diffusion

1.4 Éléments de théorie spectrale

Dans cette section $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert séparable sur $\mathbb{C}$. On note $\langle \cdot, \cdot \rangle$ son produit scalaire, qui par convention est antilinéaire par rapport à la seconde variable.

1.4.1 Opérateurs non-bornés

Définition 1.4.1 *Un opérateur sur $\mathcal{H}$ (ou opérateur non-borné) est la donnée d'un sous-espace vectoriel $\mathcal{D}$ de $\mathcal{H}$, et d'une application linéaire $A : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{H}$. L'espace $\mathcal{D}$ est le domaine de l'opérateur A . On le note $(\mathcal{D}, A)$ et l'on parle de l'opérateur A , de domaine $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}$. Si $\mathcal{D}' \subset \mathcal{D}$ et $Au = A'u$ pour tout $u \in \mathcal{D}'$, on dit que $(\mathcal{D}, A)$ est une extension de $(\mathcal{D}', A')$, ce que l'on note $(\mathcal{D}', A') \subset (\mathcal{D}, A)$.*

On dit qu'un opérateur $(\mathcal{D}, A)$ est borné lorsque la quantité

$$\|A\| = \sup\{\|Au\|, u \in \mathcal{D}, \|u\| = 1\}$$

est finie. Dans ce cas A est une application linéaire continue sur $\mathcal{D}$, et lorsque $\mathcal{D}$ est dense dans $\mathcal{H}$, A s'étend de manière unique un opérateur borné sur $\mathcal{H}$. On note $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ l'espace des applications linéaires continues sur $\mathcal{H}$.

Sauf mention explicite du contraire, on considèrera toujours des opérateurs à domaine dense.

Opérateurs fermés

Le théorème du graphe fermé affirme qu'un opérateur fermé de domaine $\mathcal{H}$ est borné. Rappelons la

Définition 1.4.2 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur, et $G(A) = \{(x, Ax), x \in \mathcal{D}\}$ son graphe. On dit que $(\mathcal{D}, A)$ est*

1. *fermé lorsque G est un sous-espace fermé de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$.*
2. *fermable si $\bar{G}$ est un graphe, i.e.*

$$(x, y) \in \bar{G}, (x, y') \in \bar{G} \implies y = y'.$$

On note alors $(\bar{\mathcal{D}}, \bar{A})$ l'opérateur dont le graphe est $\bar{G}$. C'est une extension de $(\mathcal{D}, A)$.

La linéarité de A donne un critère simple pour montrer qu'un opérateur est fermable : il suffit de vérifier que si $(0, y) \in G$, alors $y = 0$.

L'opérateur $(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), \Delta)$ n'est pas fermé : il existe $u \in H^2(\mathbb{R}^d) \setminus \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d)$. Si (u_n) est une suite de $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ qui tend vers u , alors Δu_n tend vers Δu dans L^2 mais $\Delta u \notin \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d)$. Par contre l'opérateur $(H^2(\mathbb{R}^d), \Delta)$ est fermé. En effet soit $u \in H^2$ et (u_n) une suite de H^2 qui tend vers u dans L^2 . Si v est la limite de Δu_n dans L^2 , on voit immédiatement que $v = \Delta u$ dans $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$, puis que $u \in H^2$ (utiliser la transformée de Fourier par exemple). L'opérateur $(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), \Delta)$ est fermable, et sa fermeture est $(H^2(\mathbb{R}^d), \Delta)$: il suffit de vérifier que dans $\mathcal{H}^2$, $(u_n) \rightarrow 0$ et $-\Delta u_n \rightarrow v$ entraînent $v = 0$.

Lemme 1.4.3 *Un opérateur $(\mathcal{D}, A)$ est fermable si et seulement si il admet une extension fermée.*

Preuve: On a vu que si $(\mathcal{D}, A)$ est fermable, $(\bar{\mathcal{D}}, \bar{A})$ en est une extension fermée. Supposons qu'il existe $(\mathcal{D}', A')$ fermé tel que $(\mathcal{D}, A) \subset (\mathcal{D}', A')$. Alors le graphe de A est inclus dans le graphe de A' , et en prenant l'adhérence, $\bar{G}(A) \subset G(A')$, donc $\bar{G}(A)$ est un graphe. $\square$

On note au passage que toute extension fermée de $(\mathcal{D}, A)$ est une extension de $(\bar{\mathcal{D}}, \bar{A})$.

Adjoint

Définition 1.4.4 *L'adjoint d'un opérateur $(\mathcal{D}, A)$ est l'opérateur $(\mathcal{D}^*, A^*)$ dont le domaine $\mathcal{D}^*$ est l'ensemble des $u \in \mathcal{H}$ tel que $v \mapsto \langle u, Av \rangle$ s'étend en une forme antilinéaire continue sur $\mathcal{H}$. D'après le théorème de Riesz, il existe $w \in \mathcal{H}$ tel que $\langle u, Av \rangle = \langle w, v \rangle$ pour tout $v \in \mathcal{H}$, et A^* est l'opérateur qui à $u \in \mathcal{D}^*$ associe ce w .*

Remarque 1.4.5 *Puisque $\mathcal{D}$ est dense dans $\mathcal{H}$, $\mathcal{D}^*$ peut aussi être décrit comme l'ensemble des $u \in \mathcal{H}$ pour lesquels il existe $C(u) > 0$ tel que, pour tout $v \in \mathcal{D}$, $|\langle u, Av \rangle| \leq C(u)\|v\|$. En effet pour $v \in \mathcal{H}$ et $(v_n) \subset \mathcal{D}$ telle que $(v_n) \rightarrow v$, la suite $(\langle u, Av_n \rangle)$ est une suite de Cauchy de $\mathbb{C}$ et notant $\ell_u(v)$ sa limite, on voit facilement que ℓ_u est une forme linéaire continue sur $\mathcal{H}$ qui prolonge $v \in \mathcal{D} \mapsto \langle u, Av \rangle$.*

Par exemple l'adjoint de $(\mathcal{D}, A) = (\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), \Delta)$ est $(H^2(\mathbb{R}^d), \Delta)$. En effet pour $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$, et $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, on a $\langle u, \Delta v \rangle_{L^2} = \langle \Delta u, \bar{v} \rangle$, où le dernier crochet désigne l'action de la distribution Δu sur la fonction $\bar{v}$. Or $v \mapsto \langle \Delta u, \bar{v} \rangle$ s'étend en une forme continue sur L^2 si et seulement si $\Delta u \in L^2$. Donc le domaine de l'adjoint de $(\mathcal{D}, A)$ est $\mathcal{D}' = \{u \in L^2, \Delta u \in L^2\} = H^2$. Enfin pour $u \in H^2$ et $v \in L^2$ on a $\langle \Delta u, \bar{v} \rangle = \langle \Delta u, v \rangle_{L^2}$ donc $A^*u = \Delta u$.

Attention : rien ne dit à priori que l'ensemble $\mathcal{D}^*$ défini ci-dessus est dense dans $\mathcal{H}$. On a cependant le

Lemme 1.4.6 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur, et G son graphe. Si G^* désigne le graphe de l'adjoint de A , on a*

$$G^* = [J(\bar{G})]^\perp, \quad J : (u, v) \mapsto (v, -u).$$

En particulier $(\mathcal{D}^, A^*)$ est un opérateur fermé.*

Preuve: Soit $(u, v) \in G^*$, i.e. $u \in \mathcal{D}^*$ et $v = A^*u$. Pour $(u_0, v_0) \in J(\bar{G})$, il existe une suite $((u_n, v_n))_n \subset G$ telle que $(v_n, -u_n) = J(u_n, v_n) \rightarrow (u_0, v_0)$. On a donc

$$\langle (u, v), (u_0, v_0) \rangle_{\mathcal{H} \times \mathcal{H}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle u, v_n \rangle - \langle v, u_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle u, Au_n \rangle - \langle A^*u, u_n \rangle = 0,$$

ce qui montre que $G^* \subset [J(\bar{G})]^\perp$. Réciproquement, pour $(u, v) \in [J(\bar{G})]^\perp$ et $(u_0, v_0) \in G$ on a $\langle (u, v), (v_0, -u_0) \rangle = 0$, donc $\langle u, Au_0 \rangle = \langle v, Au_0 \rangle$, ce qui montre que $u \in \mathcal{D}^*$ et $A^*u = v$. $\square$

Proposition 1.4.7 *L'espace $\mathcal{D}^*$ est dense dans $\mathcal{H}$ si et seulement si $(\mathcal{D}, A)$ est fermable. Dans ce cas l'adjoint de $(\mathcal{D}^*, A^*)$ est $(\bar{\mathcal{D}}, \bar{A})$, ce que l'on note $A^{**} = \bar{A}$. De plus on a*

$$\text{Ker } A^* = (\text{Im } A)^\perp.$$

Preuve: On note que $(0, v_0) \in \bar{G} \Leftrightarrow J(0, v_0) \in J(\bar{G}) \Leftrightarrow \forall (u, v) \in G^*, \langle J(0, v_0), (u, v) \rangle = 0$, ce qui donne $(0, v_0) \in \bar{G} \Leftrightarrow \forall u \in \mathcal{D}^*, \langle v_0, u \rangle = 0$. Donc $(0, v_0) \in \bar{G}$ si et seulement si $v_0 \in (\mathcal{D}^*)^\perp$, et $\mathcal{D}^*$ est dense si et seulement si G est fermable.

Soit $u \in \text{Ker } A^*$ et $w \in \text{Im } A$. Il existe $v \in \mathcal{D}$ tel que $Av = w$, donc $\langle u, w \rangle = \langle u, Av \rangle = \langle A^*u, v \rangle = 0$, donc $u \in (\text{Im } A)^\perp$. Réciproquement, si $v \in (\text{Im } A)^\perp$, il existe $(v_n)_n \in \mathcal{D}^*$ tel que $v_n \rightarrow v$. Pour $u \in \mathcal{D}$ on a $0 = \langle Au, v \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle Au, v_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle u, A^*v_n \rangle$. Puisque A^* est fermé on a $\langle u, A^*v \rangle = 0$, puis $A^*v = 0$ par densité de $\mathcal{D}$.

Enfin pour $(\mathcal{D}, A)$ fermable, et compte tenu du fait que $J^2 = -1$, le Lemme 1.4.6 donne $(G^*)^* = \bar{G}$. $\square$

Notons enfin que si $(\mathcal{D}_1, A_1) \subset (\mathcal{D}_2, A_2)$ alors $(\mathcal{D}_2^*, A_2^*) \subset (\mathcal{D}_1^*, A_1^*)$.

Opérateurs symétriques et autoadjoints

Définition 1.4.8 *On dit qu'un opérateur $(\mathcal{D}, A)$ est symétrique lorsque*

$$\forall u, v \in \mathcal{D}, \langle Au, v \rangle = \langle u, Av \rangle.$$

Par exemple $(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), \Delta)$ est symétrique, tout comme $(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), -\Delta + V(x))$ lorsque $V \in L^\infty$ est une fonction à valeurs réelles.

Tout opérateur symétrique est fermable. D'autre part, lorsque $(\mathcal{D}, A)$ est symétrique, son adjoint $(\mathcal{D}^*, A^*)$ est une extension de sa fermeture $(\bar{\mathcal{D}}, \bar{A})$.

Définition 1.4.9 *On dit qu'un opérateur (forcément symétrique et fermé) $(\mathcal{D}, A)$ est autoadjoint lorsque $(\mathcal{D}^*, A^*) = (\mathcal{D}, A)$.*

Pour les opérateurs symétriques qui ne sont pas fermés, on a la

Définition 1.4.10 *On dit qu'un opérateur symétrique $(\mathcal{D}, A)$ est essentiellement autoadjoint lorsque $(\bar{\mathcal{D}}, \bar{A})$ est autoadjoint.*

L'opérateur $(H^2(\mathbb{R}^d), \Delta)$ est auto-adjoint. On a vu en effet que $(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), \Delta)$ est fermable, de fermeture $(H^2(\mathbb{R}^d), \Delta)$. De plus $(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), \Delta)^* = (H^2(\mathbb{R}^d), \Delta)$, donc $(H^2(\mathbb{R}^d), \Delta)^* = (\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), \Delta)^{**} = (H^2(\mathbb{R}^d), \Delta)$. Du coup $(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d), \Delta)$ est essentiellement autoadjoint.

Lemme 1.4.11 *Si l'opérateur symétrique $(\mathcal{D}, A)$ est essentiellement autoadjoint, alors il admet une unique extension autoadjointe.*

Preuve: Si $(\mathcal{D}', A')$ est une extension autoadjointe de $(\mathcal{D}, A)$, on a nécessairement $(\bar{\mathcal{D}}, \bar{A}) \subset (\mathcal{D}', A')$ puisque $(\mathcal{D}', A')$ est fermé, puis l'égalité en passant à l'adjoint. $\square$

Proposition 1.4.12 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur symétrique. S'il existe $z \in \mathbb{C}$ tel que $\text{Im}(A + z)$ et $\text{Im}(A + \bar{z})$ sont denses dans $\mathcal{H}$, alors A est essentiellement autoadjoint.*

Preuve: Soit $u \in \mathcal{D}^*$, et $\tilde{u} = A^*u$. Puisque $\text{Im}(A + \bar{z})$ est dense dans $\mathcal{H}$, il existe une suite (v_n) de $\mathcal{D}$ telle que $(A + \bar{z})v_n \rightarrow \tilde{u} + \bar{z}u$. Pour $\phi \in \mathcal{D}$ on a alors

$$\langle u, (A + z)\phi \rangle = \langle u, A\phi \rangle + \bar{z}\langle u, \phi \rangle = \langle \tilde{u} + \bar{z}u, \phi \rangle = \lim_{n \rightarrow +\infty} \langle (A + \bar{z})v_n, \phi \rangle = \lim_{n \rightarrow +\infty} \langle v_n, (A + z)\phi \rangle,$$

puisque A est symétrique et $v_n, \phi \in \mathcal{D}$. Puisque $\text{Im}(A + z)$ est dense dans $\mathcal{H}$, on en déduit que $u = \lim(v_n)$, puis que $\tilde{u} = \lim(Av_n)$, donc $(u, \tilde{u}) \in G(\bar{A})$ et $(\mathcal{D}^*, A^*) \subset (\bar{\mathcal{D}}, \bar{A})$. $\square$

Par exemple l'oscillateur harmonique $(\mathcal{C}_0^\infty, P_{osc})$ est essentiellement autoadjoint. Il s'agit bien sûr d'un opérateur symétrique, qui, tout comme $(\mathcal{C}_0^\infty, -\Delta)$, n'est pas fermé. On se contente de le montrer pour $(\mathcal{D}, P_{osc})$, où (cf. Lemme 1.2.1),

$$\mathcal{D} = \{x \mapsto x^\alpha e^{-x^2/2}, \alpha \in \mathbb{N}^d\}.$$

On a vu que $\mathcal{D}$ est dense dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, et que $P_{osc}(\mathcal{D}) = \mathcal{D}$. La proposition précédente (avec $z = \pm i$) montre que $(\mathcal{D}, P_{osc})$ est essentiellement autoadjoint.

On peut montrer que le domaine de l'extension autoadjointe de l'oscillateur harmonique est

$$\mathcal{B}_2 = \{u \in L^2, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}^d, |\alpha + \beta| \leq 2, \Rightarrow x^\alpha \partial_x^\beta u \in L^2\}.$$

1.4.2 Spectre et résolvante

Spectre

Définition 1.4.13 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur non-borné à domaine dense. On note $\rho(A)$ l'ensemble des $z \in \mathbb{C}$ tels que*

1. $(A - zI) : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{H}$ est injectif,

2. $\mathcal{H}_z = (A - zI)(\mathcal{D})$ est dense dans $\mathcal{H}$,
3. $(A - zI)^{-1} : \mathcal{H}_z \rightarrow \mathcal{D}$ est borné.

Définition 1.4.14 Le spectre $\sigma(A)$ de $(\mathcal{D}, A)$ est le complémentaire de $\rho(A)$ dans $\mathbb{C}$. Le spectre ponctuel $\sigma_p(A)$ de A est l'ensemble des $z \in \mathbb{C}$ tels que $\text{Ker}(A - zI) \neq \{0\}$. Le spectre continu $\sigma_c(A)$ est l'ensemble des $z \in \mathbb{C}$ tels que $\text{Ker}(A - zI) = \{0\}$, $\mathcal{D}'$ est dense, et $(A - zI)^{-1} : \mathcal{D}' \rightarrow \mathcal{D}$ n'est pas borné. Enfin le spectre résiduel $\sigma_r(A)$ est l'ensemble des $z \in \mathbb{C}$ tels que $\text{Ker}(A - zI) = \{0\}$ et $\mathcal{D}'$ n'est pas dense.

On a bien sur

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

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

Remarque 1.4.15 Par le théorème de l'application ouverte, le fait que $(A - zI) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ soit bijectif entraîne automatiquement que son inverse est borné. Pour $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, l'ensemble résolvant est donc l'ensemble des $z \in \mathbb{C}$ tels que $(A - zI) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ est bijectif.

Résolvante

On se limite maintenant aux opérateurs fermés.

Définition 1.4.16 Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur fermé. L'application

$$\mathcal{R}_A : z \in \rho(A) \mapsto (A - zI)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$$

est appelé la résolvante de A .

Lemme 1.4.17 Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur fermé, et $\mathcal{R}_A$ sa résolvante. On a les propriétés suivantes :

1. $\rho(A^*) = \overline{\rho(A)}$, et $\overline{\mathcal{R}_A(z)} = \mathcal{R}_{A^*}(\bar{z})$,
2. Pour $z, z' \in \rho(A)$, $\mathcal{R}_A(z) - \mathcal{R}_A(z') = (z - z')\mathcal{R}_A(z)\mathcal{R}_A(z')$.
3. Pour $z, z' \in \rho(A)$, $\mathcal{R}_A(z)\mathcal{R}_A(z') = \mathcal{R}_A(z')\mathcal{R}_A(z)$.

Preuve: Le premier point découle directement de la relation $\text{Ker}(A^*) = \text{Im}(A)^\perp$, et du fait que $(A^*)^{-1} = (A^{-1})^*$, ce que l'on peut prouver en utilisant le Lemme 1.4.6.

Le deuxième point s'appelle "première formule de la résolvante". Il suffit de calculer

$$\begin{aligned} (A - z)^{-1} - (z - z')(A - z)^{-1}(A - z')^{-1} &= (A - z)^{-1}[I - (z - z')(A - z')^{-1}] \\ &= (A - z)^{-1}[I - (z - A + A - z')(A - z')^{-1}] = (A - z')^{-1}. \end{aligned}$$

Enfin le troisième point s'obtient en échangeant z et z' dans (2). $\square$

Proposition 1.4.18 *L'ensemble $\rho(A)$ est un ouvert de $\mathbb{C}$, et $\mathcal{R}_A$ est une application holomorphe, par exemple dans le sens où, pour tout $u, v \in \mathcal{H}$, $z \mapsto \langle \mathcal{R}_A(z)u, v \rangle$ est holomorphe. Enfin pour $z \in \rho(A)$ on a*

$$(1.4.1) \quad \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(A))} \leq \|\mathcal{R}_A(z)\|.$$

Preuve: Soit $z_0 \in \rho(A)$. Pour $z \in \rho(A)$ la première formule de la résolvante itérée donne

$$\mathcal{R}_A(z) = \sum_{j=0}^n (z - z_0)^j \mathcal{R}_A(z_0)^{j+1} + (z - z_0)^{n+1} \mathcal{R}_A(z_0)^{n+1} \mathcal{R}_A(z),$$

ce qui conduit à poser $\mathcal{R}_\infty(z) = \sum_{j=0}^{\infty} (z - z_0)^j \mathcal{R}_A(z_0)^{j+1}$ pour $z \in \mathbb{C}$ tel que $|z - z_0| \leq$

$\|\mathcal{R}_A(z_0)\|^{-1}$. On montre alors facilement que $\mathcal{R}_\infty(z)$ est l'inverse de $(A - z)$ pour ces z là, ce qui prouve la proposition. $\square$

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

Proposition 1.4.19 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur fermé. $z \in \mathbb{C}$ appartient au spectre de A s'il existe une suite (ψ_n) de $\mathcal{D}$ telle que $\|\psi_n\| = 1$ et $\|(A - z)\psi_n\| \rightarrow 0$. La réciproque est vraie si z est un point du bord du spectre.*

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

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

ce qui est absurde.

Réciproquement supposons que $z \in \partial\sigma(A)$. Soit (z_n) une suite de $\rho(A)$ telle que $\text{dist}(z_n, z) = \frac{1}{n}$. D'après l'inégalité (1.4.1), il existe une suite $\tilde{\phi}_n$ telle que $\|\tilde{\phi}_n\| = 1$ et $\|R(z_n)\tilde{\phi}_n\| \geq n$. On pose $\phi_n = \tilde{\phi}_n / \|R(z_n)\tilde{\phi}_n\|$. Alors $\|\phi_n\| \rightarrow 0$ et si $\psi_n = R(z_n)\phi_n$ on a $\|\psi_n\| = 1$ et

$$(A - z)\psi_n = (A - z_n)\psi_n + (z_n - z)\psi_n = \phi_n + (z_n - z)\psi_n,$$

ce qui montre que $\|(A - z)\psi_n\| \rightarrow 0$. $\square$

Cas des opérateurs autoadjoints

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

Proposition 1.4.20 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur fermé symétrique. A est autoadjoint si et seulement si $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.*

Preuve: Supposons que $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$. Alors, par exemple, $\text{Im}(A \pm i) = \mathcal{H}$, donc A est essentiellement autoadjoint d'après la Proposition 1.4.12. Réciproquement si A est autoadjoint, pour $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, $(A - z)$ est injectif puisque si $z = x + iy \in \mathbb{C}$, on a $\|(A - z)u\|^2 = \|(A - x)u\|^2 + y^2\|u\|^2 \geq y^2\|u\|^2$. Puisque $\text{Im}(A - z)^\perp = \text{Ker}(A - \bar{z})$, on voit que $\text{Im}(A - z)$ est dense dans $\mathcal{H}$, et on a montré aussi que $\|(A - z)^{-1}\| \leq 1/|y|$. Donc $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \subset \rho(A)$. $\square$

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

Proposition 1.4.21 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur autoadjoint. $z \in \mathbb{C}$ appartient au spectre de A si et seulement si il existe une suite (ψ_n) de $\mathcal{D}$ telle que $\|\psi_n\| = 1$ et $\|(A - z)\psi_n\| \rightarrow 0$.*

1.4.3 Le théorème spectral pour les opérateurs autoadjoints

Famille spectrale

Définition 1.4.22 *Une famille spectrale est une famille $(E_\lambda)_{\lambda \in \mathbb{R}}$ de projecteurs orthogonaux sur $\mathcal{H}$ telle que*

1. *Pour tout $u \in \mathcal{H}$, $E_\lambda u \rightarrow 0$ quand $\lambda \rightarrow -\infty$, et $E_\lambda u \rightarrow u$ quand $\lambda \rightarrow +\infty$.*
2. *Pour tout $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$, $E_\lambda E_\mu = E_{\min(\lambda, \mu)}$.*
3. *Pour tout $u \in \mathcal{H}$, $E_\lambda u \rightarrow E_{\lambda_0} u$ quand $\lambda \rightarrow \lambda_0^+$.*

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

$$\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_k^-} E_\lambda u = E_{\lambda_k} u - \Pi_k u.$$

En particulier, au sens des distributions, on a

$$\partial_\lambda(E_\lambda u) = \delta_{\lambda_k} \Pi_k u,$$

et donc

$$u = \sum \Pi_k u = \int d(E_\lambda u), \quad Ku = \sum \lambda_k \Pi_k u = \int \lambda d(E_\lambda u).$$

Dans le cas général, pour $u, v \in \mathcal{H}$ on montre que $\lambda \mapsto \langle E_\lambda u, v \rangle$ est une fonction croissante à variation bornée. On peut donc lui associer une mesure de Stieljes, qu'on note $d\langle E_\lambda u, v \rangle$. Disons que pour une fonction continue sur $\mathbb{R}$, $\int f(\lambda) d\langle E_\lambda u, v \rangle$ s'obtient comme limite de sommes Riemann, et c'est seulement pour intégrer les fonctions boreliennes que la notion de mesure de Stieljes est utile.

Le résultat qui suit porte le nom de Théorème Spectral.

Théoreme 1.4.23 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur autoadjoint. Il existe une famille spectrale $(E_\lambda)_{\lambda \in \mathbb{R}}$ telle que $\mathcal{D} = \{u \in \mathcal{H}, \int \lambda^2 d\langle E_\lambda u, u \rangle < \infty\}$, et pour tout $u, v \in \mathcal{D}$,*

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

Le spectre de $(\mathcal{D}, A)$ peut être caractérisé à partir sa famille spectrale. En utilisant la Proposition 1.4.21, on peut montrer la

Proposition 1.4.24 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur autoadjoint, et (E_λ) sa famille spectrale. $\lambda_0 \in \mathbb{R}$ appartient à $\sigma(A)$ si et seulement si, pour tout $\epsilon > 0$, $E(]\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon[) \neq 0$. On a noté $E(]a, b[) = \int_a^b dE_\lambda = E_b - E_a$.*

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

Proposition 1.4.25 *Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur autoadjoint. Pour $u \in \mathcal{D}$ et $z \in \mathbb{R}$, on a*

$$(1.4.2) \quad \text{dist}(z, \sigma(A)) \|u\| \leq \|(A - z)u\|.$$

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

Pour $z \in \rho(A)$ et $u = \mathcal{R}_A(z)v$ avec $\|v\| = 1$, on obtient $\|\mathcal{R}_A(z)\| \leq \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(A))}$, et compte tenu de la Proposition 1.4.18,

$$(1.4.3) \quad \|\mathcal{R}_A(z)\| = \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(A))}.$$

On retrouve en particulier le fait que, pour un opérateur autoadjoint,

$$\forall z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}, \|\mathcal{R}_A(z)\| \leq \frac{1}{\text{Im } z}.$$

Remarque 1.4.26 On a vu que l'on pouvait intégrer des fonctions boréliennes contre la mesure spectrale $d\langle E_\lambda u, v \rangle$. On note $f(A)$ l'opérateur défini par

$$(1.4.4) \quad \langle f(A)u, v \rangle = \int f(\lambda) d\langle E_\lambda u, v \rangle.$$

Lorsque $f(\lambda) = (\lambda - z)^{-1}$ pour un $z \in \rho(A)$, on a bien $f(A) = R_A(z)$. Plus généralement la formule (1.4.4) ci-dessus redonne $f(A)$ dans tous les cas où cette expression a un sens autre (par exemple lorsque f est un polynôme, ...).

Spectre discret, spectre essentiel

Définition 1.4.27 On appelle spectre discret d'un opérateur autoadjoint $(\mathcal{D}, A)$ l'ensemble des valeurs propres λ de A qui sont isolés dans $\sigma(A)$ et de multiplicité ($\dim \text{Ker}(A - \lambda)$) finie. On le note $\sigma_{disc}(A)$, et on appelle spectre essentiel de A son complémentaire : $\sigma_{ess}(A) = \sigma(A) \setminus \sigma_{disc}(A)$.

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

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

On a vu par exemple que $(H^2(\mathbb{R}^d), -\Delta)$ est autoadjoint. Sa famille spectrale est $E_\lambda = \mathcal{F}^{-1} \mathbf{1}_{\xi^2 \leq \lambda} \mathcal{F}$, et son spectre est inclus dans $[0, +\infty[$. On peut montrer aussi que

$$\sigma(-\Delta) = \sigma_{ess}(-\Delta) = [0, +\infty[,$$

par exemple en utilisant la notion de suite de Weyl :

Définition 1.4.28 Soit $(\mathcal{D}, A)$ un opérateur autoadjoint, et $\lambda \in \mathbb{R}$. On dit qu'une suite (u_n) de $\mathcal{D}$ est une suite de Weyl pour A et λ lorsque $\|u_n\| = 1$, u_n tend vers 0 faiblement et $\|(A - \lambda)u_n\| \rightarrow 0$.

L'intérêt de cette définition réside dans la

Proposition 1.4.29 $\lambda \in \mathbb{R}$ appartient au spectre essentiel de A si et seulement si il existe une suite de Weyl pour A et λ .

On peut vérifier que la suite (u_n) définie ci-dessous est une suite de Weyl pour $(H^2(\mathbb{R}^d), -\Delta)$ et λ lorsque $\lambda > 0$ (cf. e.g. [14, Section 7.3]) :

$$u_n(x) = \mathcal{F}_{\xi \rightarrow x}^{-1}(e^{-n^2|\xi - \xi_0|^2}), \quad \lambda = |\xi_0|^2.$$

1.4.4 Perturbation d'opérateurs autoadjoints

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

Théorème de Kato-Rellich

Définition 1.4.30 Soit $(\mathcal{D}_A, A)$ et $(\mathcal{D}_B, B)$ deux opérateurs, avec $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_B$. On dit que B est A -borné lorsque pour un $a > 0$, il existe $b > 0$ tel que, pour tout $u \in \mathcal{D}_A$,

$$\|Bu\| \leq a\|Au\| + b\|u\|$$

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

Lorsque A est autoadjoint, en appliquant le théorème du graphe fermé, on peut voir que tout opérateur fermé B tel que $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_B$ est A -borné. Ce qui suit repose sur le

Lemme 1.4.31 Soit $(\mathcal{D}_A, A)$ un opérateur autoadjoint, et $(\mathcal{D}_B, B)$ un opérateur tel que $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_B$. B est A -borné si et seulement si il existe $z \in \rho(A)$ tel que $B\mathcal{R}_A(z)$ est un opérateur borné (c'est alors le cas pour tout $z \in \rho(A)$ grâce à la première formule de la résolvante). La borne relative a de B pour A est donnée par

$$a = \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \|B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)\|.$$

Preuve: Supposons que $B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)$ soit borné pour un $\lambda > 0$. Par la première formule de la résolvante c'est vrai pour tout $\lambda > 0$, et on note $\|B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)\| = a_\lambda$. On a immédiatement

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

ce qui montre que B est A -borné et que sa borne relative a vérifie pour tout $\lambda > 0$ l'inégalité $a \leq \|B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)\|$, donc

$$a \leq \liminf_{\lambda \rightarrow +\infty} \|B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)\|.$$

Réciproquement, supposons que B soit A -borné, de borne relative a . Pour $\epsilon > 0$, il existe $b > 0$ tel que

$$\|B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)u\| \leq (a + \epsilon)\|A\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)u\| + b\|\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)u\|.$$

Or par le théorème spectral, on a $\|\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)u\| \leq \frac{1}{\lambda}\|u\|$ et

$$\|A\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)u\|^2 = \int \frac{\mu^2}{\mu^2 + \lambda^2} d\langle E_\mu u, u \rangle \leq \|u\|.$$

Donc $\|B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)\|$ est un opérateur borné de norme inférieure à $(a + \epsilon) + b/\lambda$. Ceci étant vrai pour tout $\epsilon > 0$, on voit que $\limsup_{\lambda \rightarrow +\infty} \|B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)\| \leq a$. $\square$

Voilà enfin le Théorème de Kato-Rellich.

Proposition 1.4.32 *Soit $(\mathcal{D}_A, A)$ un opérateur autoadjoint (resp. essentiellement autoadjoint), et $(\mathcal{D}_B, B)$ un opérateur symétrique A -borné de borne relative inférieure à 1. Alors $(\mathcal{D}_A, A + B)$ est autoadjoint (resp. essentiellement autoadjoint).*

Preuve: Supposons $(\mathcal{D}_A, A)$ autoadjoint. D'après le lemme précédent, il existe $\lambda > 0$ tel que $\|B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)\| < 1$, et donc $I + B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda)$ est inversible. Or $(A + B \pm i\lambda) = (I + B\mathcal{R}_A(\pm i\lambda))(A \pm i\lambda)$, donc $(A + B \pm i\lambda)$ est d'image dense. $\square$

Théorème de Weyl

Définition 1.4.33 *Soit $(\mathcal{D}_A, A)$ un opérateur fermé et $(\mathcal{D}_B, B)$ un opérateur tel que $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_B$. On dit que B est A -compact lorsqu'il existe $z \in \rho(A)$ tel que $B\mathcal{R}_A(z)$ est compact (c'est alors le cas pour tout $z \in \rho(A)$ grâce à la première formule de la résolvante).*

Si B est A -compact, B est A -borné de borne relative 0. Cela découle du Lemme 1.4.31 et de l'identité $B\mathcal{R}_A(i\lambda) = (B\mathcal{R}_A(i))(A + i)\mathcal{R}_A(i\lambda)$: le premier opérateur est compact, et le second tend vers 0 fortement quand $\lambda \rightarrow +\infty$ (par exemple avec le théorème spectral). Le théorème de Kato-Rellich peut donc s'appliquer dans ce cas.

Proposition 1.4.34 *Théorème de Weyl.*

Si $(\mathcal{D}_A, A)$ est un opérateur autoadjoint, et $(\mathcal{D}_B, B)$ un opérateur symétrique A -compact, alors $(\mathcal{D}_A, A + B)$ est autoadjoint et

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

Remarque 1.4.35 *Le théorème de Weyl sert aussi sous la forme suivante : s'il existe $z \in \rho(A+B) \cap \rho(A)$ tel que $\mathcal{R}_{A+B}(z) - \mathcal{R}_A(z)$ est compact, alors $\sigma_{ess}(A+B) = \sigma_{ess}(A)$. Cet énoncé entraîne le précédent compte tenu de la seconde identité de la résolvante :*

$$\mathcal{R}_{A+B}(z) = -\mathcal{R}_A(z)B\mathcal{R}_{A+B}(z) = -\mathcal{R}_{A+B}(z)B\mathcal{R}_A(z).$$

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

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

De plus on a

$$\begin{aligned} (A - \lambda)v_n &= (A - \lambda)\mathcal{R}_A(z)u_n = u_n + (z - \lambda)\mathcal{R}_A(z)u_n \\ &= u_n + (z - \lambda)\mathcal{R}_{A+B}(z)u_n - Ku_n = \mathcal{R}_{A+B}(z)(A + B - \lambda)u_n - Ku_n, \end{aligned}$$

où $K = \mathcal{R}_{A+B}(z) - \mathcal{R}_A(z)$ est compact par hypothèse, ce qui montre que $\|(A - \lambda)v_n\| \rightarrow 0$. La réciproque s'obtient en échangeant les rôles de $A+B$ et A .

□

Ce théorème permet en particulier de montrer que si $V \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ tend vers 0 à l'infini, alors le spectre essentiel de l'opérateur de Schrödinger $P = -h^2\Delta + V$ est le même que celui de $-h^2\Delta$, i.e. $\sigma_{ess}(P) = [0, +\infty[$. On a en effet le

Lemme 1.4.36 *Si $V \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ tend vers 0 à l'infini, alors V est $-\Delta$ compact.*

Preuve: Il s'agit de montrer que $V(-\Delta + 1)^{-1}$ est compact. Puisque $(-\Delta + 1)^{-1}$ est continu de $H^2(\mathbb{R}^d)$ dans L^2 , il suffit de montrer que $V : H^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$ est un opérateur compact. Soit (V_k) la suite d'opérateurs définis par

$$V_k : u \mapsto \phi\left(\frac{x}{k}\right)V(x)u(x), \quad \phi \in \mathcal{C}_0^\infty(B(0, 1)).$$

Rappelons que pour $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, l'application $H^s(\mathbb{R}^d) \ni u \mapsto \phi u \in H^t(\mathbb{R}^d)$ est compacte pour $t > s$. Chaque V_k est donc un opérateur compact de H^2 dans L^2 puisque composé de la multiplication par $\phi_k = \phi(\frac{\cdot}{k}) \in \mathcal{S}$, qui est compacte de H^2 dans L^2 , et de la multiplication par $V \in L^\infty$ qui est continue de L^2 dans L^2 . Enfin on voit que

$$\|V_k - V\|_{\mathcal{L}(H^2, L^2)} \leq \sup_{|x| > k} |V(x)|,$$

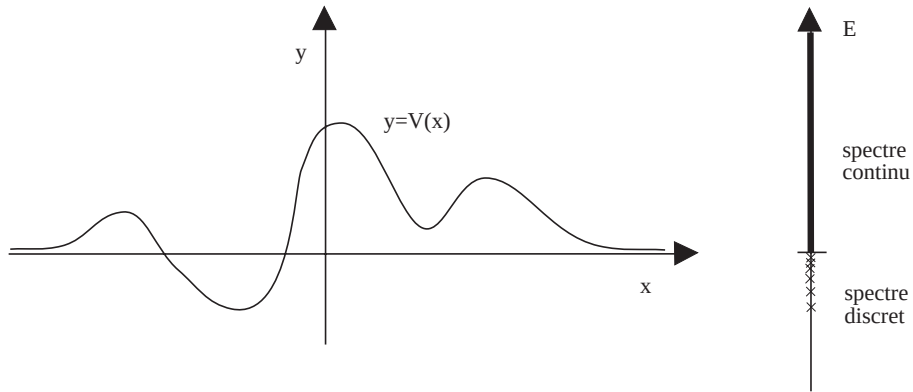


FIG. 1.4 – Spectre d'un opérateur de Schrödinger quand V tend vers 0 à l'infini

ce qui montre que (V_k) tend fortement vers V quand V tend vers 0 à l'infini. $\square$

Résumons : lorsque $V \in L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ et $V(x) \rightarrow 0$ quand $|x| \rightarrow \infty$, $(\mathcal{C}_0^\infty, P = -\hbar^2 \Delta + V)$ est un opérateur essentiellement autoadjoint. Son spectre essentiel est $[0, +\infty[$, et P peut avoir des valeurs propres négatives, isolées et de multiplicité finie. Le seul point d'accumulation possible de l'ensemble des valeurs propres négative est 0.

Références pour cette section : [12],[5, Chapitres 8 et 9], [6], [19]

Chapitre 2

Analyse semiclassique

2.1 Transformation de F.B.I. et Microsupport

Pour cette section, on suit de très près le livre d'A. Martinez [20, Chapitre 3].

2.1.1 Définition et exemples

Si $u \in L^2$ est une fonction d'onde, on veut pouvoir décrire quantitativement u au voisinage de la position $x \in \mathbb{R}^d$ et, en même temps, au voisinage de l'impulsion $\xi \in \mathbb{R}^d$. On est bien sûr limité par le principe d'incertitude. Voici l'outil essentiel de ce cours.

Définition 2.1.1 Soit $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$. On appelle transformée de Fourier-Bros-Iagolnitzer-Sjöstrand la fonction $\mathcal{T}u$ définie sur $\mathbb{R}^{2d}$ par

$$\mathcal{T}u(x, \xi; h) = \alpha_{d,h} \int e^{i(x-y) \cdot \xi / h - (x-y)^2 / 2h} u(y) dy = \alpha_{d,h} \langle u, e^{i(x-\cdot) \cdot \xi / h - (x-\cdot)^2 / 2h} \rangle_{\mathcal{S}', \mathcal{S}},$$

où $\alpha_{d,h} = 2^{-d/2} (\pi h)^{-3d/4}$.

Remarque 2.1.2 La fonction $\mathcal{T}u$ est $\mathcal{C}^\infty$ sur $\mathbb{R}^{2d}$: c'est un exercice de théorie des distributions (cf. la preuve du Lemme 2.1.7 ci-dessous).

L'idée derrière cette définition est la suivante : on commence par localiser u près de x en considérant la fonction (plutôt la distribution) $v : y \mapsto e^{-(x-y)^2 / 2h} u(y)$. Notons d'ailleurs que $\|(y-x)v(y)\|_{L^2} = O(\sqrt{h})$. Ensuite l'on prend la transformée de Fourier de v au point ξ . Le fait que l'on ait ainsi localisé aussi $\mathcal{F}_h u$ près de la fréquence ξ peut se lire sur le

Lemme 2.1.3 Pour $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ on a

$$\mathcal{T}u(x, \xi, h) = e^{ix \cdot \xi / h} (\mathcal{T} \circ \mathcal{F}_h)(u)(\xi, -x, h).$$

Compte tenu de ce lemme, on a en effet $\mathcal{T}u(x, \xi, h) = \mathcal{F}_{h, \eta \rightarrow -x}(e^{-(\xi - \eta)^2 / 2h} \mathcal{F}_h u(\eta))$ et, comme ci-dessus, $\|(\eta - \xi)e^{-(\xi - \eta)^2 / 2h} \mathcal{F}_h u(\eta)\| = O(\sqrt{h})$.

Preuve: Par définition

$$\mathcal{T}(\mathcal{F}_h u)(a, b; h) = \alpha_{d, h} \langle \mathcal{F}_h u, e^{i(a - \cdot) \cdot b / h - (a - \cdot)^2 / 2h} \rangle = \alpha_{d, h} \langle u, \mathcal{F}_h(e^{i(a - \cdot) \cdot b / h - (a - \cdot)^2 / 2h}) \rangle,$$

et il s'agit donc de calculer

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{h, y \rightarrow \eta}(e^{i(a - y) \cdot b / h - (a - y)^2 / 2h}) &= \frac{1}{(2\pi h)^{d/2}} \int e^{-iy \cdot \eta / h} e^{i(a - y) \cdot b / h - (a - y)^2 / 2h} dy. \\ &= e^{-iy \cdot a / h} \mathcal{F}_{h, v \rightarrow \eta}(e^{-v^2 / 2h})(y + b), \\ &= e^{-iy \cdot a / h} e^{-(y + b)^2 / 2h}. \end{aligned}$$

On trouve bien la relation annoncée en prenant $a = \xi$ et $b = -x$. $\square$

Dans la démonstration précédente, et à de très nombreuses reprises dans ce qui suit, on utilise l'égalité

$$(2.1.1) \quad \mathcal{F}_{h, x \rightarrow \xi}(e^{-\lambda x^2 / 2h}) = \frac{1}{\lambda^{d/2}} e^{-\xi^2 / 2\lambda h},$$

qu'on peut obtenir par exemple en se ramenant à la dimension 1, et en considérant l'équation différentielle ordinaire dont le membre de droite est solution.

Exemple 2.1.4 Transformée de FBI d'une gaussienne :

$$(2.1.2) \quad \mathcal{T}(e^{-x^2 / 2h})(x, \xi, h) = (4\pi h)^{-d/4} e^{ix \cdot \xi / h - (x^2 + \xi^2) / 4h}.$$

On calcule en effet, en utilisant (2.1.1),

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(e^{-x^2 / 2h})(x, \xi, h) &= \alpha_{d, h} \int e^{i(x - y) \cdot \xi / h} e^{-[(x - y)^2 / 2h + y^2] / 2h} dy \\ &= \alpha_{d, h} e^{-x^2 / 4h} \int e^{i(x - y) \cdot \xi / h} e^{-(y - \frac{x}{2})^2 / h} dy = (2\pi h)^{d/2} \alpha_{d, h} e^{-x^2 / 4h} e^{ix \cdot \xi / 2h} \mathcal{F}_{h, v \rightarrow \xi}(e^{-v^2 / h}) \\ &= (2\pi h)^{d/2} \alpha_{d, h} e^{-x^2 / 4h} e^{ix \cdot \xi / 2h} 2^{-d/2} e^{-\xi^2 / 4h}. \end{aligned}$$

Exemple 2.1.5 Etats cohérents.

On appelle état cohérent centré en (x, ξ) la fonction de $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d)$ définie par

$$\Phi_{(x, \xi)}(x', h) = (2\pi h)^{d/2} \mathcal{T}(\delta_x)(x', \xi, h) = (\pi h)^{-d/4} e^{i(x' - x) \cdot \xi / h - (x' - x)^2 / 2h}$$

Avec le Lemme 2.1.3 ci-dessus, on voit aussi que

$$(2.1.3) \quad \mathcal{T}(1)(x, \xi, h) = e^{ix \cdot \xi / h} \mathcal{T}(\mathcal{F}_h(1))(x, \xi, h) = (2\pi h)^{d/2} e^{ix \cdot \xi / h} \mathcal{T}(\delta_0)(\xi, -x, h) = \Phi_{(0, -x)}(\xi, h).$$

2.1.2 Propriétés

Proposition 2.1.6 Si $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$, alors $\mathcal{T}u \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$, et $\|\mathcal{T}u\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} = \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$, i.e. $\mathcal{T} : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^{2d})$ est une isométrie.

Preuve: Soit $u \in \mathcal{C}_0^\infty$. La fonction $\mathcal{T}u$ est $\mathcal{C}^\infty$ donc localement intégrable, et pour $M, N > 0$ on calcule

$$\|\mathbf{1}_{|x| \leq M, |\xi| \leq N} \mathcal{T}u\|^2 = \alpha_{d,h}^2 \int \mathbf{1}_{|x| \leq M, |\xi| \leq N}(x, \xi) \mathcal{T}u(x, \xi, h) \overline{\mathcal{T}u(x, \xi, h)} dx d\xi.$$

Avec Fubini (la fonction qu'on intègre est à support compact) on obtient $\|\mathbf{1}_{|x| \leq M, |\xi| \leq N} \mathcal{T}u\|^2 = \alpha_{d,h}^2 \int_{|x| \leq M} f_N(x, h) dx$ avec

$$f_N(x, h) = \left\langle \int_{|\xi| \leq N} e^{i(y'-y) \cdot \xi / h} d\xi, e^{-[(x-y)^2 + (x-y')^2]/2h} u(y) \overline{u(y')} \right\rangle_{y, y'}$$

Or, quand $N \rightarrow +\infty$, $\int e^{i(y'-y) \cdot \xi / h} \mathbf{1}_{|\xi| \leq N} d\xi \rightarrow (2\pi h)^d \delta_{y-y'}$ dans $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, donc $f_N(x, h) \rightarrow (2\pi h)^d \int e^{-(x-y)^2/h} |u(y)|^2 dy$. Finalement

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \alpha_{d,h}^2 \int_{|x| \leq M} f_N(x, h) dx = (2\pi h)^d \alpha_{d,h}^2 \int |u(y)|^2 \left(\int_{|x| \leq M} e^{-(x-y)^2/h} dx \right) dy,$$

et

$$\lim_{M \rightarrow +\infty} \lim_{N \rightarrow +\infty} \|\mathbf{1}_{|x| \leq M, |\xi| \leq N} \mathcal{T}u\|^2 = \|u\|^2,$$

ce qui achève la preuve de la proposition. $\square$

Pour $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$, on a donc $u = \mathcal{T}^* \mathcal{T}u$, où $\mathcal{T}^*$ est l'adjoint de $\mathcal{T}$ donné, pour $v \in \mathcal{T}(L^2(\mathbb{R}^d)) \subset L^2(\mathbb{R}^d) \cap \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ par

$$\mathcal{T}^* v(y, h) = \alpha_{d,h} \int e^{-i(x-y) \cdot \xi / h - (x-y)^2/2h} u(x, \xi) dx d\xi.$$

L'intégrale ci-dessus n'est pas absolument convergente, mais elle prend un sens lorsque l'on utilise l'opérateur $L(\xi, hD_x) = \langle \xi \rangle^{-2} (1 + h\xi \cdot D_x)$, notant que

$$(2.1.4) \quad L(\xi, hD_x)(e^{i(x-y) \cdot \xi / h}) = e^{i(x-y) \cdot \xi / h}.$$

On peut alors écrire

$$\mathcal{T}^* v(y, h) = \alpha_{d,h} \int e^{-i(x-y) \cdot \xi / h} ({}^t L(\xi, hD_y))^{d+1} [e^{-(x-y)^2/2h} u(x, \xi)] dx d\xi.$$

où $({}^t L(\xi, hD_x))^{d+1}$ est un opérateur différentiel en la variable x dont les coefficients sont $O(\langle \xi \rangle^{-(d+1)})$. Les intégrales de ce genre portent le nom d'intégrales oscillantes.

On s'intéresse maintenant à l'image $\mathcal{T}(L^2(\mathbb{R}^d))$ de L^2 par $\mathcal{T}$. On sait déjà que $\mathcal{T}(L^2(\mathbb{R}^d)) \subset L^2(\mathbb{R}^d) \cap \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, en particulier que $\mathcal{T} : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$ n'est pas surjective. On a d'abord le

Lemme 2.1.7 Soit $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$. L'application $\mathcal{B}u : \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}$ définie par

$$\mathcal{B}u(z, h) = e^{(\operatorname{Im} z)^2/2h} \mathcal{T}u(\operatorname{Re} z, -\operatorname{Im} z, h)$$

est une fonction entière.

Preuve: Notons $z = x - i\xi$. Un calcul simple donne

$$\mathcal{B}u(z, h) = \alpha_{h,d} \langle u_y, e^{-(z-y)^2/2h} \rangle,$$

et il s'agit de montrer que $f : z \mapsto \langle u_y, e^{-(z-y)^2/2h} \rangle$ est $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}_{(x,\xi)}^{2d})$, et que $\partial_{\bar{z}} f(z) = 0$. Montrons par exemple que f est dérivable par rapport à x . On a

$$\frac{f(x+s, \xi) - f(x, \xi)}{s} = \langle u_y, \frac{g(x+s, \xi, y) - g(x, \xi, y)}{s} \rangle, \quad g(x, \xi, y) = e^{-(x-i\xi-y)^2/2h},$$

et l'on voit que $\frac{1}{s}(g(x+s, \xi, y) - g(x, \xi, y))$ converge dans $\mathcal{S}$ quand $s \rightarrow 0$, évidemment vers $\partial_x g(x, \xi, y)$, par exemple en écrivant

$$g(x+s, \xi, y) - g(x, \xi, y) - s\partial_x g(x, \xi, y) = s^2 \int_0^1 (1-t) \partial_x^2 g(x+ts, \xi, y) dt.$$

On montre de la même manière que f est dérivable par rapport à ξ , et, finalement,

$$\partial_{\bar{z}} \mathcal{B}u(z, h) \alpha_{h,d} \langle u_y, \partial_{\bar{z}}(e^{-(z-y)^2/2h}) \rangle = 0,$$

où $\partial_{\bar{z}} = \frac{1}{2i}(\partial_x - i\partial_\xi)$ compte tenu de $z = x - i\xi$. □

La transformation $\mathcal{B}$ est connue sous le nom de transformation de Bargmann (à une constante près disons). En écrivant que $\partial_{\bar{z}} \mathcal{B}u(z, h) = 0$ on obtient la relation utile

$$(2.1.5) \quad hD_x \mathcal{T}(u)(x, \xi, h) = (\xi + ihD_\xi) \mathcal{T}(u)(x, \xi, h).$$

Pour la question qui nous occupe, on a montré que $\mathcal{T}(L^2(\mathbb{R}^d)) \subset L^2(\mathbb{R}^d) \cap e^{-\xi^2/2h} \mathcal{H}ol_{x-i\xi}(\mathbb{C}^d)$, où $\mathcal{H}ol_{x-i\xi}(\mathbb{C}^d)$ désigne l'ensemble des fonctions holomorphes de $z = x - i\xi$. Cette fois l'inclusion inverse est vraie, et on a la

Proposition 2.1.8 La transformation $\mathcal{T} : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^{2d}) \cap e^{-\xi^2/2h} \mathcal{H}ol_{x-i\xi}(\mathbb{C}^d)$ est une bijection, et $\mathcal{T}\mathcal{T}^* : L^2(\mathbb{R}^{2d}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^{2d})$ est le projecteur orthogonal sur $L^2(\mathbb{R}^{2d}) \cap e^{-\xi^2/2h} \mathcal{H}ol_{x-i\xi}(\mathbb{C}^d)$.

Preuve: au prochain épisode. □

La transformation de FBI agissant sur $\mathcal{S}$ ou $\mathcal{S}'$ aussi de bonnes propriétés :

Proposition 2.1.9 *L'application $\mathcal{T} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$ est continue, de même que l'application $\mathcal{T} : \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{2d})$, et pour $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$, on a $u = \mathcal{T}^* \mathcal{T} u$.*

Preuve: • On regarde d'abord le premier point : pour $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, on doit montrer que

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}^{2d}, \exists N \in \mathbb{N}, \exists C_{\alpha, \beta} > 0, \| (x, \xi)^\alpha \partial_{(x, \xi)}^\beta \mathcal{T} u(x, \xi, h) \|_{L^\infty} \leq C_{\alpha, \beta} \sum_{|\gamma|, |\delta| \leq N} \| x^\gamma \partial_x^\delta u(x) \|_{L^\infty}.$$

Le problème est donc en particulier de manger les ξ . On utilise à nouveau l'opérateur $L(\xi, hD_y) = \langle \xi \rangle^{-2} (1 - i\xi \cdot hD_y)$ de (2.1.4), et on écrit

$$\mathcal{T} u(x, \xi, h) = \alpha_{d, h} \int e^{i(x-y) \cdot \xi / h} ({}^t L)^N (e^{-(x-y)^2 / 2h} u(y)) dy,$$

pour un certain entier N à choisir, et l'on peut voir que pour certaines constantes $c_\mu \in \mathbb{C}$,

$$({}^t L)^N (\xi, hD_y) = \frac{1}{\langle \xi \rangle^{2N}} \sum_{|\mu| \leq N} c_\mu (h\xi)^\mu D_y^\mu.$$

Du coup pour $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{N}^d$ on a

$$\partial_x^{\beta_1} \partial_\xi^{\beta_2} \mathcal{T} u(x, \xi, h) = \alpha_{d, h} \int \partial_\xi^{\beta_2} \partial_x^{\beta_1} [e^{i(x-y) \cdot \xi / h} ({}^t L)^N (e^{-(x-y)^2 / 2h} u(y))] dy.$$

Or

$$\begin{aligned} \partial_x^{\beta_1} [e^{i(x-y) \cdot \xi / h} ({}^t L)^N (e^{-(x-y)^2 / 2h} u(y))] = \\ h^{-\beta_1} \sum_{\gamma_1 \leq \beta_1} C_{\beta_1}^{\gamma_1} i^{|\gamma_1|} (-1)^{|\beta_1 - \gamma_1|} \xi^{\gamma_1} e^{i(x-y) \cdot \xi / h} ({}^t L)^N ((x-y)^{\beta_1 - \gamma_1} e^{-(x-y)^2 / 2h} u(y)) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \partial_\xi^{\beta_2} \partial_x^{\beta_1} [e^{i(x-y) \cdot \xi / h} ({}^t L)^N (e^{-(x-y)^2 / 2h} u(y))] = \\ O(1) h^{-(|\beta_1| + |\beta_2| + N)} e^{-(x-y)^2 / 2h} \langle \xi \rangle^{|\beta_1| - N} \langle x-y \rangle^{|\beta_1| + |\beta_2| - N} \sum_{|\gamma| \leq N} |\partial_y^\gamma u(y)|. \end{aligned}$$

Enfin pour $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{N}^d$, on a

$$\begin{aligned} x^{\alpha_1} \xi^{\alpha_2} \partial_\xi^{\beta_2} \partial_x^{\beta_1} [e^{i(x-y) \cdot \xi / h} ({}^t L)^N (e^{-(x-y)^2 / 2h} u(y))] = \\ O(1) e^{-(x-y)^2 / 2h} \langle \xi \rangle^{|\alpha_2| + |\beta_1| - N} \langle x \rangle^{|\alpha_1|} \langle x-y \rangle^{|\beta_1| + |\beta_2| - N} \sum_{|\gamma| \leq N} |\partial_y^\gamma u(y)|, \end{aligned}$$

et l'on conclut en choisissant $N \geq |\alpha_2| + |\beta_1|$, remarquant que $\langle x \rangle^{|\alpha_1|} \leq C(\langle y \rangle^{|\alpha_1|} + \langle x-y \rangle^{|\alpha_1|})$, et que $\|e^{-(x-y)^2 / 2h} \langle x-y \rangle^M\|_{L^1} < \infty$ pour tout $M \in \mathbb{N}$.

- La preuve de la continuité de $\mathcal{T} : \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{2d})$ est plus facile : par dualité, il suffit de montrer que $\mathcal{T}^* : \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ est continue. On écrit

$$y^\alpha \partial_y^\beta \mathcal{T}^* v(y, h) = \iint y^\alpha \partial_y^\beta [e^{-i(x-y) \cdot \xi/h - (x-y)^2/2h}] v(x, \xi) dx d\xi,$$

et l'on obtient, en utilisant encore une fois l'inégalité $\langle y \rangle^{|\alpha|} \leq C(\langle x \rangle^{|\alpha|} + \langle x - y \rangle^{|\alpha|})$, que

$$|y^\alpha \partial_y^\beta \mathcal{T}^* v(y, h)| = O(1) \|\langle \xi \rangle^{|\beta|+d+1} \langle x \rangle^{|\alpha|+d+1} v(x, \xi)\|_{L^\infty} \|\langle \xi \rangle^{-d-1} \langle x \rangle^{-d-1}\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d})}.$$

- On a montré que l'opérateur $\mathcal{T}^* \mathcal{T}$ envoie $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ dans $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$, et la relation $u = \mathcal{T}^* \mathcal{T} u$ est vraie pour $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Elle est donc vraie pour $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$. $\square$

2.1.3 Microsupport

Définition 2.1.10 Soit u_h une (famille de) distributions de $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$. On dit que $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ n'est pas dans le microsupport de u_h , lorsqu'il existe un voisinage $\mathcal{V}$ de (x_0, ξ_0) , et deux réels $\delta > 0$ et $h_0 > 0$ tels que

$$\forall h \in]0, h_0], \forall (x, \xi) \in \mathcal{V}, \mathcal{T}(u_h)(x, \xi, h) = O(e^{-\delta/h}).$$

On note $\text{MS}(u_h)$ le microsupport de u_h . C'est un fermé de $\mathbb{R}^{2d}$.

Exemple 2.1.11 Puisque $|\mathcal{T}(\delta)(x, \xi, h)| = \alpha_{d,h} e^{-x^2/2h}$, on a $\text{MS}(\delta) = \{0\} \times \mathbb{R}^d$. On a aussi $\text{MS}(1) = \mathbb{R}^d \times \{0\}$, puisque, de manière générale en utilisant le Lemme 2.1.3, $\text{MS}(\mathcal{F}_h u) = R_{-\pi/2}(\text{MS}(u))$, où R_θ désigne la rotation d'angle θ dans $\mathbb{R}^{2d}$.

Exemple 2.1.12 Le microsupport de l'état cohérent $\Phi_{(x,\xi)}$ est $\text{MS}(\Phi_{(x,\xi)}) = \{(x, \xi)\}$. On peut le montrer en commençant par la formule

$$\langle \Phi_{(x,\xi)}, \Phi_{(x',\xi')} \rangle = e^{-[(x-x')^2 + (\xi-\xi')^2]/4h} e^{i(x-x') \cdot (\xi+\xi')/2h},$$

puis en notant que

$$\mathcal{T}(\Phi_{(x,\xi)})(x', \xi', h) = (2\pi h)^{-d/2} \langle \Phi_{(x,\xi)}, \Phi_{(x',\xi')} \rangle.$$

On en déduit d'ailleurs aussi que $\|\Phi_{(x,\xi)}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1$.

Remarque 2.1.13 Lorsque u ne dépend pas de h , la notion de microsupport de u est fortement liée à celle de front d'onde analytique d'une distribution, noté souvent WF_a (cf. [24], [15],...). On peut montrer en effet que dans ce cas

$$\text{MS}(u) = WF_a(u) \cup (\text{supp } u \times \{0\}).$$

Dans ce cours, on s'intéressera essentiellement au microsupport de solutions d'équations h -pseudodifférentielles, et ce n'est pas cet aspect "régularité" qui importera.

On termine cette présentation de la notion de microsupport par une remarque importante. Dans les applications aux solutions d'EDP, on aura des informations plutôt sur la norme L^2 de Tu que sur sa norme L^∞ . Pour ce qui concerne le microsupport, c'est égal :

Proposition 2.1.14 *Soit $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$. Le point $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ n'est pas dans le microsupport de u si et seulement si il existe un voisinage $\mathcal{V}$ de (x_0, ξ_0) , et deux réels $\delta > 0$ et $h_0 > 0$ tels que, pour un $p \in [1, +\infty]$,*

$$(2.1.6) \quad \forall h \in]0, h_0], \|T(u_h)\|_{L^p(\mathcal{V})} = O(e^{-\delta/h}).$$

Preuve: Puisque la fonction $z \mapsto \mathcal{B}u(z, h)$ est holomorphe sur $\mathbb{C}^d$, la fonction $(z, \zeta) \mapsto \mathcal{B}u(z - i\zeta, h)$ est holomorphe sur $\mathbb{C}^{2d}$. Compte tenu du Lemme 2.1.7, on étend Tu en une fonction holomorphe sur $\mathbb{C}^{2d}$ en posant

$$Tu(x + iy, \xi + i\eta, h) = Tu(z, \zeta, h) = e^{-\zeta^2/2h} \mathcal{B}u(z - i\zeta, h).$$

En écrivant $z - i\zeta = (x + \eta) + i(y - \xi)$, on trouve

$$(2.1.7) \quad Tu(x + iy, \xi + i\eta) = e^{(y^2 + \eta^2)/2h} e^{-\xi \cdot (y + i\eta)/h} Tu(x + \eta, \xi - y).$$

Soit maintenant $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2d}$. $(x_0, \xi_0) \notin \text{MS}(u)$ si et seulement si il existe un voisinage $\mathcal{V}$ de (x_0, ξ_0) dans $\mathbb{R}^{2d}$ tel que (2.1.6) soit vraie pour $p = \infty$. Grâce à (2.1.7), c'est équivalent à l'existence d'un voisinage complexe $\mathcal{W}$ de (x_0, ξ_0) pour lequel

$$(2.1.8) \quad \forall h \in]0, h_0], \|T(u_h)\|_{L^\infty(\mathcal{W})} = O(e^{-\delta/h}).$$

En utilisant la formule de Cauchy, on voit que cette dernière assertion est équivalente à la même assertion pour n'importe quel $p \in [1, +\infty[$, et encore une fois grâce à (2.1.7), à l'assertion (2.1.6) où $\mathcal{V}$ est un autre voisinage réel de (x_0, ξ_0) . $\square$

2.2 Calcul h -pseudodifférentiel

On suit maintenant le livre de M. Dimassi et J. Sjöstrand [6]. Comme dans la section 1.1.2, on veut associer à une observable classique $a(x, \xi) \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ un opérateur non borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, ce procédé portant le nom de quantification. Comme on l'a dit, il y a plusieurs façons de faire. On va privilégier l'un des procédés, appelé quantification de Weyl, parce qu'il associe un opérateur autoadjoint à tout symbole réel.

2.2.1 Opérateurs de $\mathcal{S}$ dans $\mathcal{S}'$

Définition 2.2.1 Soit $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$ et $t \in [0, 1]$. On note $\text{Op}_{h,t}(a)$ l'opérateur défini sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ par

$$(2.2.1) \quad \text{Op}_{h,t}(a)u(x, h) = \frac{1}{(2\pi h)^d} \iint e^{i(x-y)\cdot\eta/h} a(tx + (1-t)y, \eta) u(y) dy d\eta.$$

On peut voir facilement que $\text{Op}_{h,t}(a)u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ lorsque $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. On a même mieux :

Proposition 2.2.2 Soit $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$. Pour tout $t \in [0, 1]$, $\text{Op}_{h,t}(a) : \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ est un opérateur continu.

Preuve: Il suffit de noter que $\text{Op}_{h,t}(a)u(x, h) = \langle u(y), K_a(x, y, h) \rangle$, avec K_a donné par

$$K_a(x, y, h) = \frac{1}{(2\pi h)^d} \int e^{i(x-y)\cdot\eta/h} a(tx + (1-t)y, \eta) d\eta.$$

En écrivant $K_a(x, y, h) = \tilde{a}(tx + (1-t)y, x - y)$, où $\tilde{a}(x, y) = (2\pi h)^{-d/2} \mathcal{F}_{h, \eta \rightarrow y}^{-1}(a(x, \eta))$, on voit que $K_a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. Or pour $\alpha_1, \beta_1 \in \mathbb{N}^d$, $x \mapsto x^{\alpha_1} \partial_x^{\beta_1} K_a(x, \cdot)$ appartient à $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, et

$$\begin{aligned} |x^{\alpha_1} \partial_x^{\beta_1} \langle u(y), K_a(x, y, h) \rangle| &= |\langle u, x^{\alpha_1} \partial_x^{\beta_1} K_a(x, \cdot) \rangle| \\ &\leq C \sum_{|\alpha_2|, |\beta_2| \leq N} \sup_y |y^{\alpha_2} \partial_y^{\beta_2} x^{\alpha_1} \partial_x^{\beta_1} K_a(x, y)|, \end{aligned}$$

pour un certain $N \in \mathbb{N}$ et une constante $C > 0$, ce qui prouve la proposition. $\square$

Au passage on a établi le

Lemme 2.2.3 Soit $T \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ et $g : x \mapsto \langle T, f(x, \cdot) \rangle$. La fonction g appartient à $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ et l'application $f \mapsto g$ est continue de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$ dans $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$.

On remarque maintenant que, toujours pour $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ et pour $u, v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$,

$$(2.2.2) \quad \langle \text{Op}_{h,t}(a)u, v \rangle = \langle u, \text{Op}_{h,1-t}(\bar{a})v \rangle.$$

Lorsque a est à valeurs réelles en particulier, on voit que $\text{Op}_{h,1/2}(a)$ est un opérateur symétrique.

Définition 2.2.4 Soit $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. On appelle quantifié de Weyl de a , et on note $\text{Op}_h^w(a)$, ou plus simplement $\text{Op}(a)$, l'opérateur $\text{Op}_{h,1/2}(a)$:

$$\text{Op}_h^w(a)u(x, h) = \frac{1}{(2\pi h)^d} \iint e^{i(x-y)\cdot\eta/h} a\left(\frac{x+y}{2}, \eta\right) u(y) dy d\eta.$$

Remarque 2.2.5 Pour $a = \operatorname{Re} a + i \operatorname{Im} a$ à valeurs complexes, et $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, on a

$$\operatorname{Re} \langle \operatorname{Op}_h^w(a)u, u \rangle = \langle \operatorname{Op}_h^w(\operatorname{Re} a)u, u \rangle, \text{ et } \operatorname{Im} \langle \operatorname{Op}_h^w(a)u, u \rangle = \langle \operatorname{Op}_h^w(\operatorname{Im} a)u, u \rangle.$$

On veut maintenant définir $\operatorname{Op}_{h,t}(a)$ pour un a le plus général possible.

Proposition 2.2.6 Soit $a \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. Alors l'égalité (2.2.1) définit un opérateur continu de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dans $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$. Réciproquement, tout opérateur continu de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dans $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ s'écrit $\operatorname{Op}_{h,t}(a_t)$ pour un $a_t \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, et ce pour tout $t \in [0, 1]$.

Preuve: Pour $a \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, l'expression

$$(2.2.3) \quad K_a(x, y, h) = (2\pi h)^{-d/2} \mathcal{F}_{h, \eta \rightarrow x-y}^{-1}(a(tx + (1-t)y, \eta))$$

définit un élément de $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{2d})$, et il s'agit de montrer que, pour $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, $x \mapsto \langle K_a(x, y, h), u(y) \rangle$ définit un élément de $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$, ce qui est clair puisque

$$\langle \langle K_a(x, y, h), u(y) \rangle, v(x) \rangle = \langle K_a(x, y, h), v \otimes u(x, y) \rangle.$$

On prouve en même temps la continuité.

Réciproquement, si $A : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ est un opérateur continu, A envoie $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ dans $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^d)$. Le théorème des noyaux de Schwartz dit qu'il existe $K \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^d)$ tel que, pour $u, v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d)$,

$$\langle Au, v \rangle = \langle K, u \otimes v \rangle.$$

La continuité de A entraîne que $K \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, et, compte tenu de (2.2.3), il suffit de poser

$$a_t(x, \eta) = (2\pi h)^{d/2} \int e^{-iy \cdot \eta/h} K(x + (1-t)y, x - ty) dy,$$

ce qui définit bien un élément de $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{2d})$. □

Exemple 2.2.7 Si $a(x, \xi) = \sum_{|\alpha| \leq N} a_\alpha(x) \xi^\alpha$ un polynôme en ξ à coefficients $\mathcal{C}^\infty$, $\operatorname{Op}_{h,1}(a)$ est l'opérateur différentiel obtenu en remplaçant ξ par hD_x :

$$\operatorname{Op}_{h,1}(a) = \sum_{|\alpha| \leq N} a_\alpha(x) (hD_x)^\alpha,$$

et l'on parle de quantification à droite pour $t = 1$. D'autre part $\operatorname{Op}_{h,0}(a) = \sum_{|\alpha| \leq N} (hD_x)^\alpha a_\alpha(x)$, et l'on parle de quantification à gauche pour $t = 0$.

Exemple 2.2.8 Soit $a(x, \xi) = x \cdot \xi$. Pour $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ on a

$$\text{Op}_{h,t}(a)u(x, h) = \frac{1}{(2\pi h)^d} \sum_{j=1}^d \iint e^{i(x-y) \cdot \eta/h} (tx_j + (1-t)y_j) \eta_j u(y) dy d\eta.$$

On trouve $\text{Op}_{h,1}(a)u(x, h) = x \cdot hD_x u(x)$, $\text{Op}_{h,0}(a)u(x, h) = hD_x \cdot xu(x)$ et $\text{Op}_h^w(a) = \frac{1}{2}(x \cdot hD_x + hD_x \cdot x) = x \cdot hD_x - i\frac{hd}{2}$.

Exemple 2.2.9 Soit $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d)$ et $p(x, \xi) = \xi^2 + V(x)$. Pour $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ on a

$$\begin{aligned} \text{Op}_{h,t}(p)u(x, h) &= \frac{1}{(2\pi h)^d} \iint e^{i(x-y) \cdot \eta/h} (\eta^2 + V(tx + (1-t)y)) u(y) dy d\eta \\ &= -h^2 \Delta u(x) + V(x)u(x). \end{aligned}$$

Dans ce cas, $\text{Op}_{h,t}(p)$ ne dépend donc pas de t .

Exemple 2.2.10 On a vu que si $\chi \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d)$, et $a(x, \xi) = \chi(x)$, $\text{Op}_{h,t}(a)$ est l'opérateur de multiplication par χ . Si $a(x, \xi) = \chi(\xi)$, $\text{Op}_{h,t}(a)$ est l'opérateur de convolution par $\mathcal{F}_h^{-1}(\chi)$: $\text{Op}_{h,t}(a)u(x, h) = \mathcal{F}_h^{-1}(\chi) * u(x)$.

Exemple 2.2.11 Observables linéaires.

Soit $a \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ une observable réelle et linéaire, i.e. que l'on peut écrire

$$(2.2.4) \quad \ell(x, \xi) = a \cdot x + \alpha \cdot \xi, \text{ avec } a, \alpha \in \mathbb{R}^d.$$

On voit facilement que $\text{Op}_{h,t}(\ell)$ ne dépend pas de t , et donc que $(\mathcal{S}(\mathbb{R}^d), \ell(x, hD_x))$ est un opérateur symétrique (c'est le quantifié de Weyl d'un symbole réel). Il est même essentiellement autoadjoint. On peut aussi montrer que, pour $t \in \mathbb{R}$,

$$(2.2.5) \quad e^{it \text{Op}(\ell)/h} = \text{Op}(e^{-it\ell(x, \xi)/h}),$$

où le membre de gauche peut être défini par le théorème spectral. On peut aussi considérer que $e^{it \text{Op}(\ell)/h} u_0$ désigne la solution, unique dans $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1(\mathbb{R}_t, L^2(\mathbb{R}^d))$, du problème de Cauchy

$$\begin{cases} ih\partial_t u(t) = \text{Op}(\ell)u(t), \\ u(0) = u_0 \in \mathcal{S}. \end{cases}$$

A partir de la formule (2.2.5) par exemple, on peut montrer avec un peu de travail la

Proposition 2.2.12 Pour $a, b \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$, on a

$$\text{Op}_h^w(a) \circ \text{Op}_h^w(b) = \text{Op}_h^w(c),$$

où $c \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$, qu'on note $c = a \# b$, est donné par

$$(2.2.6) \quad c(x, \xi, h) = e^{ih\sigma(D_x, D_\xi; D_y, D_\eta)/2} a(x, \xi) b(y, \eta)|_{y=x, \eta=\xi},$$

avec $\sigma(x, \xi; y, \eta) = \xi \cdot y - x \cdot \eta$.

De manière plus explicite,

$$e^{ih\sigma(D_x, D_\xi; D_y, D_\eta)/2} a(x, \xi) b(y, \eta) = \frac{1}{(2\pi h)^{2d}} \mathcal{F}_{h, (x', \xi', y', \eta') \rightarrow (x, y, \xi, \eta)}^{-1} (e^{i\sigma(x', \xi'; y', \eta')/2h} \hat{a}(x', \xi') \hat{b}(y', \eta')).$$

On a des formules similaires pour les quantifications avec $t \neq 1/2$. Il est important de remarquer que même si a et b ne dépendent pas de h , $a \# b$ en dépend en général. Autrement dit, si l'on veut avoir une classe d'opérateurs stable par composition, il faut nécessairement considérer des observables qui dépendent de h .

2.2.2 Calcul symbolique

Définition 2.2.13 On dit qu'une fonction $g \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^D, \mathbb{R}_+^*)$ est une fonction d'ordre lorsque, pour tout $\alpha \in \mathbb{N}^D$, $\partial_X^\alpha g(X) = O(g(X))$.

Dans ce qui suit, on aura la plupart du temps $X = (x, \xi) \in \mathbb{R}^{2d}$, et on utilisera essentiellement des fonctions d'ordre de type $g(x, \xi) = \langle \xi \rangle^m$ pour $m \in \mathbb{R}$, voire $g(x, \xi) = \langle (x, \xi) \rangle^m$.

On vérifie facilement (formule de Leibniz) que si g_1 et g_2 sont des fonctions d'ordre, alors $g_1 g_2$ en est une, de même que $1/g_1$.

Définition 2.2.14 Soit g une fonction d'ordre. On dit qu'une famille (a_h) de fonctions $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^D)$ appartient à $S_D(g)$ lorsque pour tout $\alpha \in \mathbb{N}^D$, il existe une constante $C_\alpha > 0$, indépendante de h , telle que, pour tout $h \in]0, h_0]$,

$$|\partial_X^\alpha a_h(X)| \leq C_\alpha g(X)$$

Remarque 2.2.15 Il est parfois utile de noter que $a \in S_D(g)$ est équivalent (grâce à la formule de Leibniz) à $a/g \in S_D(1)$.

Remarque 2.2.16 On peut aussi considérer l'ensemble $S_{D,\delta}(g)$, avec $\delta \in [0, 1/2]$, des fonctions vérifiant

$$|\partial_X^\alpha a_h(X)| \leq C_\alpha h^{-\delta|\alpha|} g(X),$$

mais les résultats qui suivent (en particulier ceux concernant la composition des symboles) sont plus difficiles à prouver dans ce cadre, et on n'en aura pas besoin.

Les fonctions de $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^D)$ sont des symboles dans $S_D(1)$, et si $V \in S_d(1)$, $p(x, \xi) = \xi^2 + V(x)$ appartient à $S_{2d}(\langle \xi \rangle^2)$. Par contre un symbole ne peut pas être trop oscillant quand $h \rightarrow 0$, ni trop croissant à l'infini : par exemple $x \mapsto e^{-x^2/2h}$ et $x \mapsto e^{x^2}$ ne sont pas des symboles (pour aucun g).

Exemple 2.2.17 Soit (a_j) une suite de fonctions $\mathcal{C}^\infty$. En utilisant le Lemme de Borel, on peut montrer qu'il existe $a_h \in S(g)$ telle que, pour tout $N \in \mathbb{N}$ et tout $\alpha \in \mathbb{N}^D$, il existe $h_{N,\alpha} > 0$ tel que, pour tout $h \in]0, h_{N,\alpha}]$,

$$(2.2.7) \quad \partial_X^\alpha(a_h(X) - \sum_{j=0}^N a_j(X)h^j) = h^{N+1}O(g(X)).$$

On note alors $a_h \sim \sum_{j \geq 0} a_j(X)h^j$.

Définition 2.2.18 On appelle symbole classique un élément de $S_D(g)$ pour lequel il existe une suite (a_j) telle que $a_h \sim \sum_{j \geq 0} a_j(X)h^j$. On note $S_D^{cl}(g)$ l'ensemble des symboles classiques.

On peut voir facilement que le produit de deux symboles $a_1 \in S(g_1)$ et $a_2 \in S(g_2)$ est un symbole de $S(g_1 g_2)$. Le produit de symboles classiques est aussi un symbole classique. Pour ce qui concerne le quotient de symboles, on doit commencer par la

Définition 2.2.19 On dit qu'un symbole $a_h \in S_D(g)$ est elliptique lorsqu'il existe $h_0 > 0$ et une constante $C > 0$ indépendante de h , telle que, pour tout $h \in]0, h_0]$,

$$|a_h(X)| \geq \frac{1}{C}g(X).$$

Dans le cas d'un symbole classique $a \sim \sum_{j \geq 0} a_j h^j$, cette condition porte uniquement sur le symbole principal a_0 . Cette définition se justifie par le résultat suivant, qui découle encore de la formule de Leibniz.

Lemme 2.2.20 Si $a \in S_D(g)$ est elliptique, alors $1/a \in S_D(g)$. De plus $1/a \in S_D^{cl}(g)$ lorsque $a \in S_D^{cl}(g)$.

On pense maintenant à la composition des opérateurs vue dans la Proposition 2.2.12.

Proposition 2.2.21 Si $a_1(x, \xi, h) \in S_{2d}(g_1)$ et $a_2(x, \xi, h) \in S_{2d}(g_2)$, alors $a_1 \# a_2$ défini par (2.2.6) appartient à $S_{2d}(g_1 g_2)$, et

$$a_1 \# a_2(x, \xi, h) \sim \sum_{k \geq 0} \frac{h^k}{k!} \left(\frac{i}{2} \sigma(D_x, D_\xi; D_y, D_\eta) \right)^k a_1(x, \xi, h) a_2(y, \eta, h)|_{y=x, \eta=\xi}.$$

Lorsque a_1 et a_2 sont des symboles classiques, l'expression ci-dessus peut-etre réordonnée pour donner un développement asymptotique de $a_1 \# a_2$. Plus précisément, si $a(x, \xi, h) \sim \sum a_j(x, \xi) h^j$ et $b(x, \xi, h) \sim \sum b_j(x, \xi) h^j$ dans S_{2d}^{cl} , et $c = a \# b$, alors $c \in S_{2d}^{cl}$, et, notant $c(x, \xi, h) \sim \sum c_j(x, \xi) h^j$ on a par exemple

$$(2.2.8) \quad c_0(x, \xi) = a_0(x, \xi) b_0(x, \xi), \quad c_1(x, \xi) = a_0 b_1 + a_1 b_0 - \frac{i}{2} \{a_0, b_0\},$$

où $\{a, b\}$ désigne le crochet de Poisson de a et b :

$$\{a, b\} = \partial_\xi a \partial_x b - \partial_x a \partial_\xi b.$$

On remarque en particulier que $a \# b - b \# a \in h S_{2d}(g_1 g_2)$, avec

$$(2.2.9) \quad a \# b - b \# a = \frac{h}{2i} \{a, b\} + h^2 S_{2d}(g_1 g_2).$$

On termine par le

Lemme 2.2.22 *Soit $a \in S_D^{cl}(g)$ un symbole elliptique. Il existe $b \in S_D^{cl}(1/g)$ tel que $a \# b = 1 + O(h^N) S_D(g)$ pour tout $N \in \mathbb{N}$.*

Preuve: On pose $b_0 = 1/a_0 \in S_D(1/g)$. On a vu que $a \# b_0 - 1 = h \tilde{a}_1$ pour un $\tilde{a}_1 \in S_D^{cl}(1)$. On cherche ensuite $b_1 \in S_D(1)$ (indépendant de h) tel que $a \# (b_0 + h b_1) - 1 \in h^2 S_D(1)$, ce qui revient à $a \# b_1 + \tilde{a}_1 \in h S_D(1)$, et l'on voit que $b_1 = -\frac{\tilde{a}_1, 0}{a_0}$ convient. En répétant l'argument, on obtient par récurrence une suite (b_j) avec $b_j \in S_D(1/g)$ et telle que, pour tout $N \in \mathbb{N}$,

$$a \# \left(\sum_{j=0}^N h^j b_j \right) = h^{N+1} r_N(h),$$

avec $r_N(h) \in S_D(1)$. Il reste à choisir b dans $S_D^{cl}(1/g)$ tel que $b \sim \sum_{j \geq 0} h^j b_j$. $\square$

2.2.3 Opérateurs h -pseudodifférentiels

Définition 2.2.23 *On note $\Psi_h(g)$ l'ensemble des opérateurs de la forme $\text{Op}_h^w(a_h)$, où $a_h \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ appartient à $S_{2d}(g)$. On désigne les éléments de $\Psi_h(g)$ sous le nom d'opérateurs h -pseudodifférentiels.*

Remarque 2.2.24 *Dans cette définition, le choix de la quantification de Weyl est sans importance. On peut montrer en effet que pour tout $t \in [0, 1]$, il existe $a_{t,h} \in S_{2d}(g)$ tel que $\text{Op}_{h,t}(a_{t,h}) = \text{Op}_h^w(a_h)$. On obtient donc le même ensemble d'opérateurs si l'on choisi une autre quantification.*

Proposition 2.2.25 Si $A \in \Psi_h(g)$, alors $A : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ est un opérateur continu, de même que $A : \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$.

Le résultat qui suit est un peu pénible à démontrer, et on omet la preuve. C'est pourtant la pierre angulaire du calcul pseudodifférentiel.

Proposition 2.2.26 Si $A_1 = \text{Op}(a_1) \in \Psi_h(g_1)$ et $A_2 = \text{Op}(a_2) \in \Psi_h(g_2)$, alors $A_1 \circ A_2 \in \Psi_h(g_1 g_2)$ et $A_1 \circ A_2 = \text{Op}(a_1 \# a_2)$.

Pour être utilisables en mécanique quantique, les opérateurs h -pseudodifférentiels doivent être de bons opérateurs sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. La proposition suivante est la variante semiclassique du Théorème de Calderon-Vaillancourt.

Proposition 2.2.27 Si $a_h \in S(1)$, alors $\text{Op}(a) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$. De plus il existe une constante $C > 0$ indépendante de h telle que, pour tout $h \in]0, 1]$,

$$\|\text{Op}(a)u\|_{L^2} \leq C\|u\|_{L^2}.$$

A partir de ce résultat et du théorème de composition, on voit facilement que si $p(x, \xi) = \xi^2 + V(x)$ appartient à $S_{2d}(\langle \xi \rangle^2)$ (par exemple lorsque $V \in S_d(1)$), l'opérateur de Schrödinger $P(x, hDx) = (hD)^2 + V(x)$ est un opérateur borné de $H^2(\mathbb{R}^d)$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. En effet, posant $q(x, \xi) = \langle \xi \rangle^{-2} p(x, \xi)$, on a $q \in S_{2d}(1)$ et

$$P = \text{Op}(p) = \text{Op}(q) \text{Op}(\langle \xi \rangle^2) + hR,$$

avec $\text{Op}(q)$ et $R \in \Psi_h(1)$ continus de L^2 dans L^2 et $\text{Op}(\langle \xi \rangle^2)$ continu de H^2 dans L^2 .

En raisonnant de la même manière, on peut montrer (**Exercice !**) que le domaine de l'extension autoadjointe de l'oscillateur harmonique est

$$\mathcal{B}_2 = \{u \in H^2(\mathbb{R}^d), \forall |\alpha| \leq 2, x^\alpha u \in L^2\}.$$

Voici une autre application de ce qui précède. Si $a_h \in S^{cl}(g)$ est elliptique, on voit que $\text{Op}(a) \text{Op}(1/a) = 1 + h \text{Op}(r_h)$, où $\text{Op}(r_h) \in \Psi_h(1)$ est un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. On peut faire beaucoup mieux : en utilisant le symbole b donné dans le Lemme 2.2.22, on obtient $\text{Op}(a) \text{Op}(b) = 1 + R$, avec $\|R\|_{\mathcal{L}(L^2)} = O(h^\infty)$. Autrement dit, on a trouvé un presque-inverse à droite pour $\text{Op}(a)$ qui est aussi un opérateur h -pseudodifférentiel : on parle de paramétrix (à droite) pour $\text{Op}(a)$. Bien sûr on peut construire de la même manière une paramétrix à gauche, et on réalise que la différence entre les deux paramétrixes est $O(h^\infty)$. On peut alors trouver un inverse pour $\text{Op}(a)$ en multipliant $\text{Op}(b)$ par la série de Neumann $\sum_k R^k$.

On termine par le résultat suivant, où l'on observe que la transformation de FBI transporte un opérateur h -pseudodifférentiel sur $\mathbb{R}^d$ en un opérateur h -pseudodifférentiel explicite sur $\mathbb{R}^{2d}$. Cette proposition est à rapprocher du théorème d'Egorov.

Proposition 2.2.28 Soit $p \in S_{2d}(1)$. On a la relation

$$\mathcal{T} \circ \text{Op}_{h,t}(p) = \text{Op}_{h,t}(\tilde{p}) \circ \mathcal{T},$$

où $\tilde{p} \in S_{4d}(1)$ est défini par

$$\tilde{p}(x, \xi, x^*, \xi^*) = p(x - \xi^*, x^*)$$

Preuve: On écrit la preuve pour $t = 1/2$ seulement, le cas de t quelconque se traitant exactement de la même manière. En écrivant avec des intégrales oscillantes, on a

$$\begin{aligned} & \text{Op}_{h,t}(\tilde{p})(\mathcal{T}u)(x, \xi, h) \\ &= \frac{1}{(2\pi h)^{2d}} \int e^{i(x-y) \cdot x^*/h + i(\xi-\eta) \cdot \xi^*/h} \tilde{p}\left(\frac{x+y}{2}, \frac{\xi+\eta}{2}, x^*, \xi^*\right) \mathcal{T}u(y, \eta, h) dy d\eta dx^* d\xi^* \\ &= \frac{\alpha_{d,h}}{(2\pi h)^{2d}} \int e^{i(x-y) \cdot x^*/h + i(\xi-\eta) \cdot \xi^*/h} e^{i(y-z) \cdot \eta/h - (y-z)^2/2h} p\left(\frac{x+y}{2} - \xi^*, x^*\right) u(z) dz dy d\eta dx^* d\xi^* \\ &= \frac{\alpha_{d,h}}{(2\pi h)^{2d}} \int \left\langle \int e^{i(y-z-\xi^*) \cdot \eta/h} d\eta, e^{i(x-y) \cdot x^*/h} e^{i\xi \cdot \xi^*/h} e^{-(y-z)^2/2h} p\left(\frac{x+y}{2} - \xi^*, x^*\right) u(z) \right\rangle dz dy dx^* \\ &= \frac{\alpha_{d,h}}{(2\pi h)^d} \int e^{i(x-y) \cdot x^*/h} e^{i\xi \cdot (y-z)/h} e^{-(y-z)^2/2h} p\left(\frac{x-y}{2} + z, x^*\right) u(z) dz dy dx^* \end{aligned}$$

où la dernière égalité vient de $\int e^{i(y-z-\xi^*) \cdot \eta/h} d\eta = (2\pi h)^d \delta_{\xi'=(y-z)}$. On effectue le changement de variable $y \mapsto y' = x - y + z$, et l'on obtient

$$\begin{aligned} & \text{Op}_{h,t}(\tilde{p})(\mathcal{T}u)(x, \xi, h) \\ &= \frac{\alpha_{d,h}}{(2\pi h)^d} \int e^{i(y'-z) \cdot x^*/h} e^{i\xi \cdot (x-y')/h} e^{-(x-y')^2/2h} p\left(\frac{y'+z}{2}, x^*\right) u(z) dz dy' dx^* \\ &= \alpha_{d,h} \int e^{i\xi \cdot (x-y')/h} e^{-(x-y')^2/2h} \text{Op}(p)u(y', h) dy', \end{aligned}$$

et l'on reconnaît sur cette dernière expression $\mathcal{T}(\text{Op}(p)u)(x, \xi, h)$. □

2.3 Estimations microlocales à poids exponentiels

2.3.1 Énoncé et preuve

Dans cette section on démontre un résultat d'André Martinez, qui s'avère être un outil très efficace dans les sections suivantes. Sur le plan historique, on trouve un énoncé assez proche dans [10], où les auteurs font aussi référence à un Lemme de Cordoba-Fefferman. On suit la preuve proposée dans le livre [20], qui est due principalement à S. Nakamura.

On énonce d'abord le résultat principal :

Proposition 2.3.1 Soit $p \in S_{2d}(1)$, une fonction (indépendante de h) qui s'étend holomorphiquement dans la bande $\mathcal{B} = \{(x, \xi) \in \mathbb{C}^{2d}, |\operatorname{Im} x| < a, |\operatorname{Im} \xi| < b\}$ pour certains $a, b > 0$. On suppose de plus que $\partial_{x, \xi}^\alpha p(x, \xi) = 0(1)$ dans $\mathcal{B}$.

Soit aussi $\psi \in S_{2d}(1)$ une fonction à valeurs réelles, telle que $\sup_{(x, \xi)} |\partial_x \psi(x, \xi)| < b$ et $\sup_{(x, \xi)} |\partial_\xi \psi(x, \xi)| < a$.

Alors, pour toute fonction $f \in S_{2d}(1)$, il existe $h_0 > 0$, un symbole $q \in S_{2d}^{cl}(1)$ et un opérateur $\mathcal{R}(h) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^{2d}))$ tels que

$$1. \quad q(x, \xi, h) \sim \sum_{j \geq 0} q_j(x, \xi) h^j, \text{ avec}$$

$$q_0(x, \xi) = f(x, \xi) p(x - \partial_x \psi - i \partial_\xi \psi, \xi - \partial_\xi \psi + i \partial_x \psi),$$

$$2. \quad \|\mathcal{R}(h)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^{2d}))} = O(h^\infty),$$

$$3. \quad \text{Pour tous } u, v \in L^2(\mathbb{R}^d),$$

$$(2.3.1) \quad \langle f e^{\psi/h} \mathcal{T} \operatorname{Op}_h^w(p) u, e^{\psi/h} \mathcal{T} v \rangle = \langle (q(x, \xi, h) + R(h)) e^{\psi/h} \mathcal{T} u, e^{\psi/h} \mathcal{T} v \rangle.$$

On découpe la preuve de la proposition en deux lemmes.

Lemme 2.3.2 Soit $Q = \operatorname{Op}(q) \in \Psi_{4d, h}^{cl}(1)$ avec $q \sim \sum_{j \geq 0} q_j h^j$, et $\psi \in S_{2d}(1)$ une fonction à valeurs réelles. Il existe $\tilde{q} \in S_{2d}(1)$ et $R(h) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$, de norme $O(h^\infty)$ tels que, pour tout $u, v \in L^2(\mathbb{R}^d)$,

$$\langle Q e^{\psi/h} \mathcal{T} u, e^{\psi/h} \mathcal{T} v \rangle = \langle (\tilde{q}(x, \xi, h) + R(h)) e^{\psi/h} \mathcal{T} u, e^{\psi/h} \mathcal{T} v \rangle,$$

avec $\tilde{q}(x, \xi, h) \sim \sum_{j \geq 0} \tilde{q}_j h^j \in S_{2d}(1)$, et $\tilde{q}_0(x, \xi) = q_0(x, \xi, \xi - \partial_\xi \psi(x, \xi), \partial_x \psi(x, \xi))$.

Preuve: On note $r_1(x, \xi, x^*, \xi^*) = q_0(x, \xi, x^*, \xi^*) - q_0(x, \xi, \xi - \partial_\xi \psi(x, \xi), \partial_x \psi(x, \xi))$, et l'on a (Taylor à l'ordre 1) :

$$\begin{aligned} r_1(x, \xi, x^*, \xi^*) &= q_0(x, \xi, x^*, \xi^*) - q_0(x, \xi, \xi - \partial_\xi \psi(x, \xi), \xi^*) \\ &\quad + q_0(x, \xi, \xi - \partial_\xi \psi(x, \xi), \xi^*) - q_0(x, \xi, \xi - \partial_\xi \psi(x, \xi), \partial_x \psi(x, \xi)) \\ &= (x^* - \xi + \partial_\xi \psi(x, \xi)) k_1(x, \xi, x^*, \xi^*) + (\xi^* - \partial_x \psi(x, \xi)) k_2(x, \xi, x^*, \xi^*), \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} k_1(x, \xi, x^*, \xi^*) &= \int_0^1 \partial_{x^*} q_0(x, \xi, x^* + s(\xi + \partial_\xi \psi(x, \xi) - x^*), \xi^*) ds, \\ k_2(x, \xi, x^*, \xi^*) &= \int_0^1 \partial_{\xi^*} q_0(x, \xi, \xi + \partial_\xi \psi(x, \xi), \xi^* + s(\partial_x \psi(x, \xi) - \xi^*)) ds. \end{aligned}$$

On voit d'ailleurs que $k_1, k_2 \in S_{4d}(1)$. On pose ensuite $F = \text{Op}(x^* - \xi - \partial_\xi \psi(x, \xi)) = hD_x - \xi - \partial_\xi \psi$, $G = \text{Op}(\xi^* - \partial_x \psi(x, \xi)) = hD_\xi - \partial_x \psi(x, \xi)$ et $K_j = \text{Op}(k_j)$, où l'on quantifie des symboles dans $S_{2(2d)}(1)$. Le calcul symbolique permet alors d'écrire

$$\text{Op}(r_1) = \frac{1}{2}(FK_1 + K_1F) + \frac{1}{2}(GK_2 + K_2F) + h \text{Op}(r_2),$$

avec $r_2 \in S_{4d}(1)$. D'autre écritures sont possibles, mais on va voir l'intérêt de cette version symétrique. Un calcul rapide, utilisant (2.1.5), donne

$$F(e^{\psi/h} \mathcal{T}u) = iG(e^{\psi/h} \mathcal{T}u),$$

et, puisque F et G sont autoadjoints,

$$\langle FK_1 e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle = \langle K_1 e^{\psi/h} \mathcal{T}u, F e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle = \langle -iGK_1 e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle.$$

On trouve donc

$$\frac{1}{2} \langle (FK_1 + K_1F) e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle = \frac{i}{2} \langle [K_1, G] e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle,$$

et de la même manière

$$\frac{1}{2} \langle (GK_2 + K_2F) e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle = \frac{i}{2} \langle [F, K_2] e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle.$$

En utilisant encore une fois le calcul symbolique, en particulier (2.2.9), on obtient

$$\langle \text{Op}(r_1) e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle = h \langle \text{Op}(q') e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle$$

Il est important de noter que $q' \in S_{4d}(1)$: par exemple le symbole du commutateur $[F, K_2]$ est borné, même si le symbole de $F = \text{Op}(x^* - \xi - \partial_\xi \psi(x, \xi))$ est en x^* . Cela provient de la Proposition 2.2.21, notant que ce symbole est toujours dérivé dans l'expression du symbole de $[F, K_2]$.

On peut encore écrire

$$\langle Q e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle = \langle \tilde{q}_0 e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle + h \langle \text{Op}(q'') e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle,$$

où q'' s'obtient en ajoutant q' et q_1 , et l'on peut appliquer la même procédure à q' . On construit ainsi par récurrence une suite $(\tilde{q}_j)$ de symboles dans $S_{2d}(1)$ tels que, pour tout $N \in \mathbb{N}$, il existe $r_N \in S_{4d}(1)$ tel que

$$\langle Q e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \rangle = \left\langle \sum_{j=0}^{N-1} h^j \tilde{q}_j e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}v \right\rangle + O(h^N) \text{Op}(r_N).$$

On peut alors trouver $\tilde{q} \in S_{4d}(1)$ tel que $\tilde{q} \sim \sum_{j \geq 0} h^j \tilde{q}_j$, et l'on pose $\tilde{R} = Q - \tilde{q}$. Pour $\tilde{u}, \tilde{v} \in \text{Im}(e^{\psi/h} \mathcal{T})$, on a

$$\langle \tilde{R} \tilde{u}, \tilde{v} \rangle = O(h^\infty),$$

et il suffit de prendre $R = \Pi_\psi \tilde{R} \Pi_\psi$, où Π_ψ est le projecteur orthogonal sur le sous-espace fermé $\text{Im}(e^{\psi/h} \mathcal{T})$. $\square$

Maintenant on réécrit le membre de gauche de l'égalité (2.3.1). La Proposition 2.2.28 donne

$$f e^{\psi/h} \mathcal{T} \circ \text{Op}(p) = f e^{\psi/h} \text{Op}(p(x - \xi^*, x^*)) \circ \mathcal{T} = [f e^{\psi/h} \text{Op}(p(x - \xi^*, x^*)) e^{-\psi/h}] e^{\psi/h} \circ \mathcal{T},$$

et l'on est ramené à montrer le

Lemme 2.3.3 *Si p, ψ et f vérifient les hypothèses de la Proposition 2.3.1, alors l'opérateur $Q = f e^{\psi/h} \text{Op}(p(x - \xi^*, x^*)) e^{-\psi/h}$ appartient à $\Psi_{4d,h}^{cl}(1)$ et notant $q \sim \sum_{j \geq 0} q_j h^j$ son symbole, on a*

$$q_0(x, \xi, x^*, \xi^*) = f(x, \xi) p(x - \xi^* - i \partial_\xi \psi, x^* + i \partial_x \psi).$$

Preuve: Pour $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ et $\nu \in \mathbb{R}$, on a

$$\begin{aligned} e^{i\nu\psi/h} \text{Op}(p(x - \xi^*, x^*)) e^{-i\nu\psi/h} v(x, \xi) = \\ \frac{1}{(2\pi h)^{2d}} \iint e^{i[(x-y) \cdot x^* + (\xi - \eta) \cdot \xi^* + \nu(\psi(x, \xi) - \psi(y, \eta))]/h} p\left(\frac{x+y}{2} - \xi^*, x^*\right) v(y, \eta) dy d\eta dx^* d\xi^*. \end{aligned}$$

On écrit, comme plus haut,

$$\psi(x, \xi) - \psi(y, \eta) = (x - y) \psi_1(x, \xi, y, \eta) + (\xi - \eta) \psi_2(x, \xi, y, \eta),$$

où $\psi_1, \psi_2 \in S_{4d}(1)$ sont des symboles à valeurs réelles, et l'on change de variables en posant

$$\tilde{x}^* = x^* + \nu \psi_1(x, \xi, y, \eta), \quad \tilde{\xi}^* = \xi^* + \nu \psi_2(x, \xi, y, \eta).$$

On obtient

$$\begin{aligned} e^{i\nu\psi/h} \text{Op}(p(x - \xi^*, x^*)) e^{-i\nu\psi/h} v(x, \xi) = \\ \frac{1}{(2\pi h)^{2d}} \iint e^{i[(x-y) \cdot \tilde{x}^* + (\xi - \eta) \cdot \tilde{\xi}^*]/h} p\left(\frac{x+y}{2} - \tilde{\xi}^* + \nu \psi_2, \tilde{x}^* - \nu \psi_1\right) v(y, \eta) dy d\eta dx^* d\xi^*. \end{aligned}$$

Puisque $|\psi_1| \leq \sup |\partial_\xi \psi|$ et $|\psi_2| \leq \sup |\partial_x \psi|$, l'application qui à ν associe le membre de droite de cette égalité s'étend en une fonction holomorphe dans un voisinage de $|\nu| \leq 1$ dans $\mathbb{C}$ (même s'il s'agit d'une intégrale oscillante). Le membre de gauche s'étend aussi en une fonction holomorphe de ν , et puisque les deux fonctions coïncident sur le réel, elles sont égales en particulier en $\nu = -i$. On a donc

$$\begin{aligned} e^{\psi/h} \text{Op}(p(x - \xi^*, x^*)) e^{-\psi/h} v(x, \xi) \\ = \frac{1}{(2\pi h)^{2d}} \iint e^{i[(x-y) \cdot \tilde{x}^* + (\xi - \eta) \cdot \tilde{\xi}^*]/h} p\left(\frac{x+y}{2} - \tilde{\xi}^* - i \psi_2, \tilde{x}^* + i \psi_1\right) v(y, \eta) dy d\eta dx^* d\xi^* \\ = \frac{1}{(2\pi h)^{2d}} \iint e^{i(X-Y) \cdot \Xi/h} a(X, Y, \Xi) v(Y) dY d\Xi, \end{aligned}$$

avec $X = (x, \xi)$, $Y = (y, \eta)$, $\Xi = (x^*, \xi^*)$ et $a(X, Y, \Xi) = p(\frac{x+y}{2} - \tilde{\xi}^* - i\psi_2, \tilde{x}^* + i\psi_1) \in S_{3(2d)}(1)$.

On a donc à faire à un opérateur pseudodifférentiel d'un type un peu différent (et qu'on a soigneusement évité jusqu'à présent) : son amplitude dépend de trois variables. De manière générale, un tel opérateur peut toujours se ramener à un opérateur h -pseudodifférentiel : on a

$$\frac{1}{(2\pi h)^{2d}} \iint e^{i(X-Y)\cdot\Xi/h} a(X, Y, \Xi) v(Y) dY d\Xi = \text{Op}(b)v(X),$$

où $b \in S_{2(2d)}(1)$ est donné par l'intégrale oscillante

$$b(X, \Xi) = \frac{1}{(2\pi h)^{2d}} \iint e^{i(\Xi-\Xi')\cdot\Theta/h} a(X + \Theta/2, X - \Theta/2, \Xi') d\Xi' d\Theta.$$

On a même, dans $S_{2(2d)}(1)$,

$$b(X, \Xi) \sim \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^{2d}} \frac{(-1)^{|\alpha|} h^{|\alpha|}}{i^{|\alpha|} \alpha!} \partial_{\Xi}^{\alpha} \partial_{\Theta}^{\alpha} a(X + \Theta/2, X - \Theta/2, \Xi)|_{\Theta=0}.$$

Lorsque a ne dépend pas de h en particulier, on voit que b est un symbole classique de symbole principal

$$b_0(X, \Xi) = a(X, X, \Xi),$$

ce qui, dans le cas qui nous occupe, donne bien $e^{\psi/h} \text{Op}(p(x - \xi^*, x^*))e^{-\psi/h} = \text{Op}(q)$ avec $q_0(x, \xi, x^*, \xi^*) = p(x - \tilde{\xi}^* - i\psi_2(x, \xi, x, \xi), \tilde{x}^* + i\psi_1(x, \xi, x, \xi)) = p(x - \xi^* - i\partial_{\xi}\psi, x^* + i\partial_x\psi)$, ce qui termine la preuve du lemme, et aussi celle de la proposition. $\square$

2.3.2 Quelques applications

Le résultat que l'on vient de prouver sert souvent sous la forme suivante :

Corollaire 2.3.4 *Sous les hypothèses de la Proposition 2.3.1, et pour $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ on a*

$$\|f e^{\psi/h} \mathcal{T} \text{Op}(p)u\|^2 = \|f(x, \xi) p(x - \partial_x \psi - i\partial_{\xi} \psi, \xi + i\partial_x \psi - \partial_{\xi} \psi) e^{\psi/h} \mathcal{T}u\|^2 + O(h) \|e^{\psi/h} \mathcal{T}u\|^2.$$

Preuve: Comme dans le Lemme 2.3.3, on note $Q = f e^{\psi/h} \text{Op}(p(x - \xi^*, x^*))e^{-\psi/h}$, et on écrit

$$\|f e^{\psi/h} \mathcal{T} \text{Op}(p)u\|^2 = \langle Q e^{\psi/h} \mathcal{T}u, Q e^{\psi/h} \mathcal{T}u \rangle = \langle Q^* Q e^{\psi/h} \mathcal{T}u, e^{\psi/h} \mathcal{T}u \rangle.$$

Grâce au calcul symbolique, on a $Q^* Q = \text{Op}(|q_0|^2) + R(h)$, où $R(h)$ est un opérateur borné sur L^2 de norme $O(1)$ grâce au théorème de Calderon-Vaillancourt, et $q_0(x, \xi)$ est donné, comme dans la preuve de la Proposition 2.3.1, par

$$q_0(x, \xi) = p(x - \xi^* - i\partial_{\xi}\psi, x^* + i\partial_x\psi)|_{x^*=\xi-\partial_{\xi}\psi, \xi^*=\partial_x\psi}.$$

$\square$

Inégalité de Gårding précisée

Dans le cas où $\psi = 0$, on peut voir en examinant la preuve du Lemme 2.3.3 que l'hypothèse d'analyticité sur p n'est pas nécessaire. Dans ce cas, la Proposition 2.3.1 s'écrit, pour $u, v \in L^2$,

$$(2.3.2) \quad \langle \text{Op}(p)u, v \rangle = \langle T \text{Op}(p)u, Tv \rangle = \langle \tilde{p}(x, \xi, h) + R(h) \rangle Tu, Tv \rangle$$

avec $\tilde{p} \sim \sum_{j \geq 0} \tilde{p}_j h^j \in S_{2d}^{cl}(1)$, $\tilde{p}_0 = p$, et $\|R(h)\|_{\mathcal{L}(L^2)} = O(h^\infty)$.

En particulier on obtient la célèbre inégalité de Gårding précisée (sharp Garding), qui dit qu'un opérateur de symbole positif ne peut pas être très négatif :

Proposition 2.3.5 *Soit $p \in S_{2d}(\langle \xi \rangle^m)$, indépendant de h , tel que $p(x, \xi) \geq C_0 \langle \xi \rangle^m$ pour tout $(x, \xi) \in \mathbb{R}^{2d}$. Alors il existe une constante $C > 0$ telle que, pour tout $u \in H^{m/2}(\mathbb{R}^d)$, on a*

$$\langle \text{Op}(p)u, u \rangle \geq (C_0 - Ch) \|u\|_{H^{m/2}}^2.$$

Preuve: Soit $u \in H^{m/2}(\mathbb{R}^d)$ et $v = \text{Op}(\langle \xi \rangle^{m/2})u \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Soit aussi $q = \langle \xi \rangle^{-m}(p - C_0) \in S_{2d}(1)$ (on peut toujours supposer $m > 0$ sinon on fait la même preuve avec $m = 0$, ce qui est encore plus simple). On applique l'inégalité (2.3.2) à $\text{Op}(q)$ et v . On obtient

$$\langle \text{Op}(q)v, v \rangle = \langle \tilde{q}_0(x, \xi)Tv, Tv \rangle + h \langle \text{Op}(r)Tv, Tv \rangle + \langle R(h)Tv, Tv \rangle$$

avec $r \in S_{2d}(1)$ et $\tilde{q}_0(x, \xi) = \langle \xi \rangle^{-m}(p(x, \xi) - C_0) \geq 0$. On a donc, pour une certaine constante $C > 0$,

$$(2.3.3) \quad \langle \text{Op}(q)v, v \rangle \geq -Ch \|v\|_{L^2}^2 = -Ch \|u\|_{H^{m/2}}^2.$$

Or par le calcul symbolique on a

$$\text{Op}(q) = \text{Op}(\langle \xi \rangle^{-m/2}) \text{Op}(p - C_0) \text{Op}(\langle \xi \rangle^{-m/2}) + h\Psi_d(1),$$

donc, par Calderon-Vaillancourt,

$$\langle \text{Op}(q)v, v \rangle = \langle \text{Op}(p - C_0) \text{Op}(\langle \xi \rangle^{-m/2})v, \text{Op}(\langle \xi \rangle^{-m/2})v \rangle + O(h) \|v\|_{L^2}^2,$$

ou encore, toujours par le calcul symbolique et Calderon-Vaillancourt,

$$(2.3.4) \quad \langle \text{Op}(q)v, v \rangle = \langle \text{Op}(p - C_0)u, u \rangle + O(h) \|u\|_{H^{m/2}}^2.$$

Le résultat découle directement de (2.3.3) et (2.3.4). □

Inégalités d'Agmon

On termine cette première liste d'applications par un résultat mentionné dans l'Introduction : les inégalités d'Agmon. Ces inégalités peuvent être obtenues directement, c'est-à-dire de manière bien plus simple que ce que l'on va faire ici, dans le cas de l'opérateur de Schrödinger (cf. par exemple [6], [11]). L'intérêt de l'approche proposée maintenant est qu'elle met bien en évidence la propriété essentielle : l'analyticité du symbole par rapport à la variable ξ .

Soit $p \in S_{2d}(\langle \xi \rangle^m)$ disons indépendant de h pour simplifier (ce qui suit marche encore pour $p = p_0 + \epsilon(h)p_1$ comme dans la section suivante). On suppose que p (et donc q) s'entend en une fonction holomorphe, cette fois seulement par rapport à ξ dans $|\operatorname{Im} \xi| \leq a$. Si ϕ est une fonction $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d)$ bornée ainsi que toutes ses dérivées, on peut considérer ϕ comme un élément de $S_{2d}(1)$. Si de plus $|\nabla \phi(x)| \leq a$, on peut appliquer ce qui précède. En particulier en raisonnant comme dans la preuve du Lemme 2.3.3, on voit que $e^{\phi/h} \operatorname{Op}(p) e^{-\phi/h} = \operatorname{Op}(p_\phi)$ avec $p_\phi \in S_{2d}^{cl}(\langle \xi \rangle^m)$ et $p_{\phi,0}(x, \xi) = p(x, \xi + i\nabla \phi(x))$. On utilise (2.3.2) pour $q = \langle \xi \rangle^{-m} p_\phi \in S_{2d}(1)$: pour $v \in L^2(\mathbb{R}^d)$, on a

$$(2.3.5) \quad \langle \operatorname{Op}(q)v, v \rangle = \langle \tilde{q}_0(x, \xi) \mathcal{T}v, \mathcal{T}v \rangle + O(h)\|v\|^2,$$

avec $\tilde{q}_0(x, \xi) = \langle \xi \rangle^{-m} p(x, \xi + i\nabla \phi(x))$.

On peut écrire le résultat correspondant pour $p \in S_{2d}(\langle \xi \rangle^m)$ grâce au calcul symbolique : notant $\Lambda_\pm = \operatorname{Op}(\langle \xi \rangle^{\pm m/2})$, on remarque que

$$\begin{aligned} \operatorname{Op}(q) &= \Lambda_- \operatorname{Op}(p_\phi) \Lambda_- + h \Lambda_- R_1 \Lambda_-, R_1 \in \Psi_d(1), \\ \Lambda_+ \Lambda_- &= 1 + h R_2, R_2 \in \Psi_d(1), \\ [\Lambda_+, e^{\phi/h}] &= h e^{\phi/h} R_3 \Lambda_+, R_3 \in \Psi_d(1). \end{aligned}$$

Soit donc $u \in H^{m/2}(\mathbb{R}^d)$, et $e^{\phi/h} u = \Lambda_- v$, avec $v \in L^2(\mathbb{R}^d)$. On a

$$\begin{aligned} \langle \operatorname{Op}(q)v, v \rangle &= \langle \Lambda_- \operatorname{Op}(p_\phi) \Lambda_- v, v \rangle + O(h)\|v\|^2 \\ &= \langle \operatorname{Op}(p_\phi) \Lambda_- v, \Lambda_- v \rangle + O(h)\|v\|^2 \\ &= \langle \operatorname{Op}(p_\phi) e^{\phi/h} u, e^{\phi/h} u \rangle + O(h)\|\Lambda_+ e^{\phi/h} u\|^2 \\ &= \langle e^{\phi/h} \operatorname{Op}(p) u, e^{\phi/h} u \rangle + O(h)\|\Lambda_+ e^{\phi/h} u\|^2 \end{aligned}$$

On a donc montré que

$$(2.3.6) \quad \langle e^{\phi/h} \operatorname{Op}(p) u, e^{\phi/h} u \rangle = \langle \tilde{q}_0(x, \xi) \mathcal{T} \Lambda_+ e^{\phi/h} u, \mathcal{T} \Lambda_+ e^{\phi/h} u \rangle + O(h)\|\Lambda_+ e^{\phi/h} u\|^2,$$

avec $\tilde{q}_0(x, \xi) = \langle \xi \rangle^{-m} p(x, \xi + i\nabla \phi(x))$.

On veut réécrire le premier terme du membre de droite de l'égalité ci-dessus, en utilisant l'estimation de Martinez. Le petit problème est que $\Lambda_+ = \operatorname{Op}(\langle \xi \rangle^{m/2})$ n'est pas un opérateur à symbole borné, et la Proposition 2.3.1 ne s'applique pas directement. Cependant, on peut reprendre sa preuve et montrer le

Lemme 2.3.6 Soit $f \in S_{2d}(1)$ et $\Lambda_+ = \text{Op}(\langle \xi \rangle^{m/2})$. Pour tous $w_1, w_2 \in H^{m/2}(\mathbb{R}^d)$ on a

$$\langle f \mathcal{T} \Lambda_+ w_1, \mathcal{T} \Lambda_+ w_2 \rangle = \langle \langle \xi \rangle^m f \mathcal{T} w_1, \mathcal{T} w_2 \rangle + h \langle R \mathcal{T} \Lambda_+ w_1, \mathcal{T} \Lambda_+ w_2 \rangle$$

où R est un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Preuve: En utilisant la Proposition 2.2.28 et le calcul h -pseudodifférentiel on obtient

$$\begin{aligned} \langle f \mathcal{T} \Lambda_+ w_1, \mathcal{T} \Lambda_+ w_2 \rangle &= \langle f \text{Op}(\langle x^* \rangle^{m/2}) \mathcal{T} w_1, \text{Op}(\langle x^* \rangle^{m/2}) \mathcal{T} w_2 \rangle \\ &= \langle \text{Op}(\langle x^* \rangle^{m/2}) f \text{Op}(\langle x^* \rangle^{m/2}) \mathcal{T} w_1, \mathcal{T} w_2 \rangle \\ &= \langle \text{Op}(f \langle x^* \rangle^m) + h \text{Op}(\langle x^* \rangle^{m/2}) R_1 \text{Op}(\langle x^* \rangle^{m/2}) \mathcal{T} w_1, \mathcal{T} w_2 \rangle \\ &= \langle \text{Op}(f \langle x^* \rangle^m) \mathcal{T} w_1, \mathcal{T} w_2 \rangle + h \langle R_1 \mathcal{T} \Lambda_+ w_1, \mathcal{T} \Lambda_+ w_2 \rangle, \end{aligned}$$

où R_1 est un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Enfin on montre comme dans le Lemme 2.3.2 que

$$\langle \text{Op}(f \langle x^* \rangle^m - f \langle \xi \rangle^m) \mathcal{T} w_1, \mathcal{T} w_2 \rangle = h \text{Op}(\langle x^* \rangle^{m/2}) R_2 \text{Op}(\langle x^* \rangle^{m/2}) \mathcal{T} w_1, \mathcal{T} w_2 \rangle,$$

pour un opérateur R_2 borné sur $L^2(\mathbb{R}^{2d})$, ce qui termine la preuve du lemme. $\square$

Compte tenu de ce lemme, l'équation (2.3.6) donne notre résultat principal :

$$(2.3.7) \quad \langle e^{\phi/h} \text{Op}(p)u, e^{\phi/h}u \rangle = \langle p(x, \xi + i\nabla\phi(x)) \mathcal{T} e^{\phi/h}u, \mathcal{T} e^{\phi/h}u \rangle + O(h) \|\Lambda_+ e^{\phi/h}u\|^2.$$

Dans le cas de l'opérateur de Schrödinger $\text{Op}(p)$ avec $p = \xi^2 + V(x) - E$, où l'on suppose $V \in S_d(1)$ et $E \in \mathbb{R}$, on obtient ainsi, pour $u \in H^1(\mathbb{R}^d)$,

$$\begin{aligned} \text{Re} \langle e^{\phi/h} \text{Op}(p)u, e^{\phi/h}u \rangle &\geq \langle (\xi^2 - |\nabla\phi|^2 + V(x) - E) \mathcal{T} e^{\phi/h}u, \mathcal{T} e^{\phi/h}u \rangle - Ch \|e^{\phi/h}u\|_{H^1}^2 \\ &\geq \langle (V(x) - E - |\nabla\phi|^2) \mathcal{T} e^{\phi/h}u, \mathcal{T} e^{\phi/h}u \rangle - Ch \|e^{\phi/h}u\|_{H^1}^2 \\ (2.3.8) \quad &\geq \int (V - |\nabla\phi(x)|^2 - E) |e^{\phi/h}u|^2 dx - Ch \|e^{\phi/h}u\|_{H^1}^2. \end{aligned}$$

On a encore utilisé (2.3.2) : si g est une fonction de x seul, $\text{Op}(g)$ est l'opérateur de multiplication par $g(x)$ et

$$\langle gw, w \rangle = \langle \mathcal{T} \text{Op}(g)w, \mathcal{T} w \rangle = \langle g(x) \mathcal{T} w, \mathcal{T} w \rangle + O(h) \|w\|_{L^2}^2.$$

L'inégalité (2.3.8) est une version un peu affaiblie de l'inégalité d'Agmon (un calcul direct montre que, dans le cas de Schrödinger, il n'y a pas de reste), mais qui suffit pour les applications habituelles de ce résultat. En particulier on voit que si l'on peut trouver une fonction ϕ qui vérifie $|\nabla\phi|^2 \leq V(x) - E - \epsilon$ sur son support, alors toute solution $u = u_h$ de l'équation $-h^2\Delta u + V(x)u = Eu$ avec $\|u\| \leq 1$ vérifie

$$\|e^{\phi/h}u\|_{L^2} = O(1),$$

uniformément quand $h \rightarrow 0$.

En dimension 1 par exemple, le meilleur choix pour ϕ consiste à prendre, pour un $\delta > 0$ petit,

$$\phi(x) = (1 - \delta) \int_+^x (V(x) - E)^{1/2} dx$$

et l'on voit que les fonctions propres sont exponentiellement petites en dehors de la zone classiquement permise où $V(x) \leq E$. Ceci se généralise en dimension supérieure, en choisissant pour $\phi(x) = (1 - \delta)\phi_E(x)$, où $\phi_E(x)$ la distance d'Agmon entre x et la région classiquement permise $\Omega_E = \{x \in \Omega, V(x) \leq E\}$, c'est à dire

$$\phi_E(x) = \inf\{d_E(x, y), y \in \Omega_E\}, \quad d_E(x, y) = \inf_{c \in \mathcal{C}(x, y)} \int_c (V(z) - E)_+^{1/2} dz.$$

où $\mathcal{C}(x, y)$ désigne l'ensemble des chemins $\mathcal{C}^1$ par morceaux entre x et y .

2.4 Microsupport des solutions d'EDP

Dans toute cette section, on considère un opérateur h -pseudodifférentiel $\text{Op}(p)$, où $p \in S_{2d}(\langle \xi \rangle^m)$, de la forme $p = p_0 + \epsilon(h)p_1$, avec $p_0, p_1 \in S_{2d}(\langle \xi \rangle^m)$, p_0 indépendant de h , et $\epsilon(h) \rightarrow 0$ quand $h \rightarrow 0$. On suppose aussi que p s'étend en une fonction holomorphe dans $\Omega_a = \{(x, \xi) \in \mathbb{C}^{2d}, |\text{Im } x| < a, |\text{Im } \xi| < a\}$. On souhaite pouvoir localiser à priori le microsupport des solutions de l'équation $Pu = 0$.

2.4.1 Ensemble caractéristique

Définition 2.4.1 On appelle ensemble caractéristique de $P = \text{Op}(p)$, et on note $\text{Car } P$ l'ensemble $p_0^{-1}(0)$.

La notation anglaise pour l'ensemble caractéristique est $\text{Char}(P)$ (on se demande bien pourquoi...).

Proposition 2.4.2 Soit $u = (u_h) \in L^2$ avec $\|u\| \leq 1$. Si $Pu = 0$ alors $MS(u) \subset \text{Car}(P)$.

Preuve: Comme on l'a déjà fait, on se ramène au cas de $p \in S_{2d}(1)$ quitte à composer $\text{Op}_h^w(p)$ par $\text{Op}_h^w(\langle \xi \rangle^{-m})$. Supposons que $(x_0, \xi_0) \notin \text{Car } P$. Il existe un voisinage complexe $\mathcal{V}$ de (x_0, ξ_0) et une constante $C_0 > 0$ tels que

$$(2.4.1) \quad \forall (x, \xi) \in \mathcal{V}, |p(x, \xi)| \geq \frac{1}{C_0}.$$

Soit alors $\psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathcal{V} \cap \mathbb{R}^{2d})$ une fonction à valeurs réelles, telle que $\psi = \delta > 0$ au voisinage de (x_0, ξ_0) et $\nabla \psi$ est suffisamment petit pour que

$$(x - 2\partial_z \psi(x, \xi), \xi + 2i\partial_z \psi(x, \xi)) \in \mathcal{V}$$

dès que $(x, \xi) \in \mathcal{V} \cap \mathbb{R}^{2d}$. Le Corollaire 2.3.4 donne alors

$$0 = \|e^{\psi/h} \mathcal{T} P u\|^2 = \|p(x - 2\partial_z \psi(x, \xi), \xi + 2i\partial_z \psi(x, \xi)) e^{\psi/h} \mathcal{T} u\|^2 + O(h) \|e^{\psi/h} \mathcal{T} u\|,$$

puis avec (2.4.1),

$$\frac{1}{C_0} \|e^{\psi/h} \mathcal{T} u\|_{L^2(\mathcal{V} \cap \mathbb{R}^{2d})}^2 \leq Ch(\|e^{\psi/h} \mathcal{T} u\|_{L^2(\mathcal{V} \cap \mathbb{R}^{2d})}^2 + \|e^{\psi/h} \mathcal{T} u\|_{L^2(\mathcal{V}^c \cap \mathbb{R}^{2d})}^2).$$

En absorbant le premier terme du membre de droite par le membre de gauche, on obtient finalement

$$\|\mathcal{T} u\|_{L^2(\mathcal{V} \cap \mathbb{R}^{2d})} \leq C_1 e^{-\delta/h} \|\mathcal{T} u\|,$$

ce qui montre que $\mathcal{T} u$ est exponentiellement petite dans un voisinage de (x_0, ξ_0) , i.e. $(x_0, \xi_0) \notin \text{MS}(u)$. $\square$

Dans ce résultat, on voit poindre le principe de correspondance entre mécanique quantique et mécanique classique. Supposons que $p(x, \xi) = \xi^2 + V(x)$ soit l'observable énergie comme dans l'Introduction. Si u est une fonction propre de l'opérateur de Schrödinger $\text{Op}(p)$ pour l'énergie E , i.e. $Pu = Eu$, on vient de voir que u est microlocalement supportée dans la surface d'énergie $p^{-1}(E)$. On peut d'ailleurs montrer que cela entraîne que u est exponentiellement petite en dehors de la région classiquement permise $V(x) \leq E$ (cf. aussi les inégalités d'Agmon).

2.4.2 Le théorème de propagation

Soit $p = p_0 + \epsilon(h)p_1$, avec $p_0, p_1 \in S_{2d}(\langle \xi \rangle^m)$, p_0 indépendant de h et $\epsilon(h) \rightarrow 0$ quand $h \rightarrow 0$. On suppose que p s'étend en une fonction holomorphe dans $\Omega_a = \{(x, \xi) \in \mathbb{C}^{2d}, |\text{Im } x| < a, |\text{Im } \xi| < a\}$, et que p_0 est à valeurs réelles sur le réel.

On rappelle d'abord quelques notions de mécanique classique (cf. aussi l'Introduction). A une fonction $p \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, on associe son champ hamiltonien H_p : c'est le champ de vecteurs sur $\mathbb{R}^{2d}$ défini par

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

On note alors $(x(t), \xi(t)) = \exp(tH_p)(x_0, \xi_0)$ la courbe intégrale de H_p issue du point (x_0, ξ_0) . C'est la solution du système d'équations différentielles

$$\begin{cases} x'(t) = \partial_\xi p(x(t), \xi(t)) \\ \xi'(t) = -\partial_x p(x(t), \xi(t)) \end{cases}$$

avec $x(0) = x_0, \xi(0) = \xi_0$. Bien sûr cette courbe, dont l'existence est assurée par le théorème de Cauchy-Lipschitz, n'est en général pas définie pour tout $t \in \mathbb{R}$ mais sur un intervalle $] -T_*, T^*[$ contenant 0. Un point remarquable est que p est constant sur les courbes intégrales de H_p :

$$\partial_t p(\exp(tH_p)(x_0, \xi_0)) = dp(\exp(tH_p)(x_0, \xi_0)) \cdot H_p(\exp(tH_p)(x_0, \xi_0)) = 0.$$

En particulier si (x_0, ξ_0) appartient à $\text{Car}(\text{Op}(p))$, la courbe intégrale issue de (x_0, ξ_0) appartient aussi à $\text{Car}(\text{Op}(p))$. De telles courbes sont appelées bicaractéristiques nulles de $\text{Op}(p)$, et la proposition suivante montre que si $Pu = 0$, $MS(u)$ est une réunion de telles bicaractéristiques.

Proposition 2.4.3 *Soit $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ une solution de l'équation $Pu = 0$, telle que $\|u\|_{L^2} \leq 1$. Soit aussi $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2d}$ et $T_* < 0 < T^* \in \mathbb{R}$ tels que $t \mapsto \exp tH_{p_0}(x_0, \xi_0)$ est bien définie sur $]T_*, T^*[$. On a les équivalences*

$$\begin{aligned} (x_0, \xi_0) \in MS(u) &\Leftrightarrow \forall t \in]T_*, T^*[, \exp tH_{p_0}(x_0, \xi_0) \in MS(u) \\ &\Leftrightarrow \exists t \in]T_*, T^*[, \exp tH_{p_0}(x_0, \xi_0) \in MS(u). \end{aligned}$$

Preuve: Soit $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2d}$. Compte tenu du fait que $MS(u) \subset \text{Car } P$, on peut d'abord supposer que $p_0(x_0, \xi_0) = 0$. On commence par se ramener au cas où $p \in S_{2d}(1)$ en travaillant avec $\tilde{p} = \langle \xi \rangle^{-m} p$. On peut en effet vérifier que la bicaractéristique de $H_{\tilde{p}}$ issue de (x_0, ξ_0) coïncide à reparamétrisation près avec la bicaractéristique de H_p issue de (x_0, ξ_0) . Dorénavant donc, $p \in S_{2d}(1)$.

On va montrer que si $(x_0, \xi_0) \notin MS(u)$, alors $(x(t), \xi(t)) \notin MS(u)$ pour tout t . Supposons au contraire que l'ensemble des $t > 0$ tels que $(x(t), \xi(t)) \in MS(u)$ ne soit pas vide, et notons T la borne inférieure de cet ensemble. D'abord $T \neq 0$ car, $MS(u)$ étant fermé, $(x(T), \xi(T)) \in MS(u)$. On a $\partial_{(x, \xi)} p_0(x_0, \xi_0) \neq 0$, puisque sinon, pour tout $t \in \mathbb{R}$, on a $(x(t), \xi(t)) = (x_0, \xi_0)$. Il existe donc un voisinage U de (x_T, ξ_T) et un $\mathcal{C}^\infty$ -difféomorphisme défini sur U qui transforme (x_T, ξ_T) en $B = (T, 0)$, et le champ de vecteur H_p en ∂_{x_1} (c'est le théorème du redressement des champ de vecteurs). Du coup, la courbe intégrale issue de (x_T, ξ_T) est transformée en un segment inclus dans la droite $x_1 = 0$. On choisit $0 < s < T$ avec $T - s > 0$ assez petit pour que $(x(s), \xi(s)) \in U$, et $\exp(sH_p)(x_T, \xi_T)$ devient le point $A = (s, 0) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{2d-1}$. Pour simplifier les notations, on va suppose que $A = (0, 0)$ et $B = (1, 0)$, et on travaille dans ce système de coordonnées. Par définition de T , on a $A \notin MS(u)$, et on va montrer que cela entraîne $B \notin MS(u)$ d'où une contradiction.

Soit $\omega_1 \subset \omega_2 \subset \omega_3$ trois voisinages de 0 dans $\mathbb{R}^{2d-1}$, et $\chi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{2d-1})$ telle que

1. $\chi = 2$ sur ω_1 ,
2. $\chi \leq 1$ sur $\omega_3 \setminus \omega_2$,
3. $\chi = 0$ sur $(\omega_3)^c$.

Soit aussi $\tilde{\psi} \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ une fonction telle que $H_p(\tilde{\psi}) = -\alpha\chi$, pour un $\alpha > 0$ à choisir. Dans les coordonnées (t, y) , cette équation n'est autre que $\partial_t \tilde{\psi}(t, y) = -\alpha\chi(y)$, et on peut prendre

$$\tilde{\psi}(t, y) = \chi(y)(1 - \alpha t).$$

Soit enfin $0 < a_1 < a_2 < a_3$ trois réels assez petits, et $\phi \in \mathcal{C}_0^\infty([-a_3, 1 + a_3])$ avec $\mathbf{1}_{[-a_2, 1+a_2]} \prec \phi \leq 1$. on pose

$$\psi(t, y) = \phi(t)\tilde{\psi}(t, y).$$

Pour $j = 1, 2, 3$, on note $G_j = [-a_j, a_j] \times \omega_j$, $D_j = [1 - a_j, 1 + a_j]$ et $T_j = [-a_j, 1 + a_j] \times \omega_j$, et on suppose que a_3 et ω_3 sont choisis suffisamment petits de sorte que V contienne G_3 . On choisit $0 < \alpha < 1/(1 + a_3)$ de sorte que $\psi(t, y) \geq 0$, et l'on voit que

$$H_p(\psi)(t, y) = \begin{cases} 0 & \text{dans } (T_3)^c, \\ -\alpha\chi(y) & \text{dans } [-a_2, 1 + a_2] \times \omega_3. \end{cases}$$

En particulier $H_p(\psi) = -2\alpha$ dans T_1 , et $H_p(\psi) \geq -\alpha$ dans $T_3 \setminus T_2$.

On utilise alors l'estimation microlocale à poids exponentiels sous la forme suivante

Lemme 2.4.4 *Soit $p \in S_{2d}(1)$ comme ci-dessus et $\psi \in S_{2d}(1)$ une fonction à valeurs réelles. On a, pour tout $\theta \in \mathbb{R}$ assez petit, et $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$*

$$\|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T} \text{Op}(p)u\|_{L^2}^2 \geq \theta^2 \|e^{\theta\psi/h} H_{p_0}(\psi) \mathcal{T}u\|_{L^2}^2 - C(h + \epsilon(h) + \theta^3) \|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2}^2.$$

Preuve: D'après le Corollaire 2.3.4, on a

$$\|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T} \text{Op}(p)u\|^2 = \|p(x - 2\theta\partial_z\psi, \xi + 2i\theta\partial_z\psi)e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|^2 + O(h) \|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|^2.$$

Or

$$p(x - 2\theta\partial_z\psi, \xi + 2i\theta\partial_z\psi)e^{\theta\psi/h} = p_0(x, \xi) - 2\theta\partial_x p_0(x, \xi)\partial_z\psi + 2i\theta\partial_\xi p(x, \xi)\partial_z\psi + (\epsilon(h) + \theta^2)S_{2d}(1),$$

ce qui donne en particulier

$$\text{Im } p(x - 2\theta\partial_z\psi, \xi + 2i\theta\partial_z\psi)e^{\theta\psi/h} = \theta H_p(\psi)(x, \xi) + (\epsilon(h) + \theta^2)S_{2d}(1).$$

On obtient alors le lemme par application de l'inégalité triangulaire et du Théorème de Calderon-Vaillancourt. $\square$

Ici on a par hypothèse $Pu = 0$, donc

$$(2.4.2) \quad \|e^{\theta\psi/h} H_p(\psi) \mathcal{T}u\|_{L^2(T_3)}^2 \leq C(\theta + \frac{h}{\theta^2}) \|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}^2,$$

ou encore (cf. Figure 2.1), pour tout $h \in]0, h_\theta]$,

$$(2.4.3) \quad \|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(T_1)} \leq \|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(T_2)} \leq C \|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d} \setminus T_2)},$$

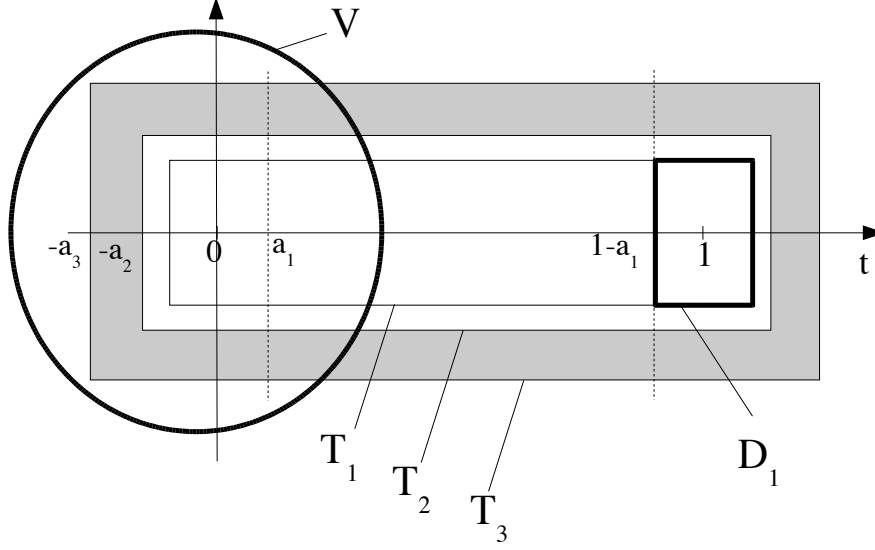


FIG. 2.1 – Preuve du lemme : notations

pour $\theta > 0$ assez petit, puisque $H_p \psi$ est borné.

On ne garde que

$$(2.4.4) \quad \|e^{\theta\psi/h} H_p(\psi) \mathcal{T}u\|_{L^2(D_1)} \leq C \|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d} \setminus T_2)}.$$

Sur D_1 on a $1+a_1 \geq t \geq 1-a_1$ et $\chi = 2$, donc $f(t, y) \geq 2(1-\alpha(1+a_1)) = \delta_1$, et l'estimation ci-dessus donne :

$$(2.4.5) \quad e^{\delta_1\theta/h} \|\mathcal{T}u\|_{L^2(D_1)} \leq C \|e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(T_3 \setminus T_2)} + \|\mathcal{T}u\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d} \setminus T_3)}.$$

Enfin on découpe $T_3 \setminus T_2$ en trois régions. Pour $t < a_1$, f peut être proche de 2, mais on est dans V , donc

$$\|\mathbf{1}_{t < a_1} e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(T_3 \setminus T_2)} \leq C e^{(\theta(2+\alpha a_1)-\delta)/h} \leq C e^{(3\theta-\delta)/h}.$$

D'autre part pour $a_1 < t < 1+a_2$ et toujours dans $T_3 \setminus T_2$, $\theta f(t, y) = \theta \phi(t) \chi(y) (1-\alpha a_1) \leq \theta(1-\alpha a_1) = \theta \delta_2$, donc

$$\|\mathbf{1}_{a_1 < t < 1+a_2} e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(T_3 \setminus T_2)} \leq e^{\theta \delta_2/h} \|\mathcal{T}u\|_{L^2(T_3 \setminus T_2)}$$

Enfin pour $t > 1+a_2$, on a $f(t, y) \leq 2(1-\alpha(1+a_2)) = \delta_3$, et

$$\|\mathbf{1}_{t > 1+a_2} e^{\theta\psi/h} \mathcal{T}u\|_{L^2(T_3 \setminus T_2)} \leq e^{\theta \delta_3/h} \|\mathcal{T}u\|_{L^2(T_3 \setminus T_2)}$$

Finalement on a donc

(2.4.6)

$$\|\mathcal{T}u\|_{L^2(D_1)} \leq C' e^{-\theta\delta_1/h} \left(e^{(3\theta-\delta)/h} + (e^{\theta\delta_2/h} + e^{\theta\delta_3/h}) \|\mathcal{T}u\|_{L^2(T_3 \setminus T_2)} + \|\mathcal{T}u\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d} \setminus T_3)} \right),$$

et il reste à choisir $\theta < \delta/3$, puis $0 < \alpha < 1/(1 + a_3)$ de sorte que $\max(\delta_2, \delta_3) < \delta_1$. Or on a toujours $\delta_3 < \delta_1$, et il suffit de prendre

$$0 < \alpha < \frac{1}{2 + a_1}$$

pour avoir $\delta_1 > \delta_2$. On a donc montrer que $\mathcal{T}u$ est exponentiellement petit dans un voisinage de $B = (1, 0)$ ce qui est absurde.

On démontre exactement de la même manière que l'ensemble des $t < 0$ tels que $(x(t), \xi(t)) \in \text{MS}(u)$ est vide, et donc finalement l'implication

$$\exists t \in]T_*, T^*[, (x(t), \xi(t)) \in \text{MS}(u) \Rightarrow (x_0, \xi_0) \in \text{MS}(u),$$

et même

$$\exists t \in]T_*, T^*[, (x(t), \xi(t)) \in \text{MS}(u) \Rightarrow \forall t \in]T_*, T^*[, (x(t), \xi(t)) \in \text{MS}(u).$$

□

Chapitre 3

Résonances quantiques

3.1 Plusieurs définitions

3.1.1 Dilatation analytique

Comme dans l'Introduction, on définit les résonances de l'opérateur de Schrödinger $P = -h^2\Delta + V$ sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, d quelconque cette fois, à l'aide des dilatations analytiques. Cette définition est due à Aguilar et J.-M. Combes [1]. Son inconvénient principal est qu'elle nécessite une hypothèse forte sur le potentiel V , qui n'est pas toujours remplie dans les cas physiques. On verra plus loin la méthode des distortions analytiques (B. Simon puis W. Hunziker [16]) qui permet définir les résonances sous des hypothèses plus générales et plus satisfaisantes. Dans cette section, le paramètre h ne joue aucun rôle, et il se peut même qu'on l'oublie.

Pour $\mu \in \mathbb{R}$, on note $U_\mu : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$ l'opérateur défini par $U_\mu\phi(x) = e^{d\mu/2}\phi(xe^\mu)$ pour $\phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ par exemple. Le choix du préfacteur fait de U_μ un opérateur unitaire avec $U_\mu^{-1} = U_\mu^* = U_{-\mu}$. On note que

$$(3.1.1) \quad U_\mu P U_\mu^* = e^{-2\mu}(-h^2\Delta) + V(xe^\mu).$$

On veut étendre l'expression ci-dessus à μ complexe, tout en contrôlant le spectre essentiel de l'opérateur obtenu. On introduit la classe correspondante de potentiels V :

Définition 3.1.1 *Soit V une fonction sur $\mathbb{R}^d$. On dit que V est dilatable analytiquement lorsque la famille d'opérateurs $(V(xe^\mu)(-h^2\Delta + 1)^{-1})_{\mu \in \mathbb{R}}$ s'étend en une famille d'opérateurs compacts sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, analytique par rapport à μ dans un voisinage complexe de 0.*

Rappelons qu'une famille (Q_μ) d'opérateurs bornés est analytique par rapport à μ lorsqu'il existe une suite (Q_j) d'opérateurs bornés telle que $Q_\mu = \sum_{j \geq 0} Q_j \mu^j$, où la série entière

$\sum_{j \geq 0} \|Q_j\| \mu^j$ a un rayon de convergence non-nul. En utilisant les inégalités de Cauchy et le théorème de Riesz, on peut voir qu'il est équivalent de dire que, pour tout u, v , l'application de $\mathbb{C}$ dans $\mathbb{C}$, définie par $\mu \mapsto \langle Q_\mu u, v \rangle$, est analytique.

Comme en dimension 1, la classe principale de potentiels qui sont dilatables analytiquement consiste en les fonctions $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d)$ qui s'étendent en une fonction holomorphe dans un secteur

$$\Omega_{\theta_0} = \{x \in \mathbb{C}^d, |\operatorname{Im} x| \leq \tan \theta_0 \langle \operatorname{Re} x \rangle\},$$

et telles que

$$V(x) \rightarrow 0 \text{ quand } |x| \rightarrow +\infty \text{ dans } \Omega_{\theta_0}.$$

Le fait qu'un tel potentiel soit dilatable découle directement du Lemme 1.4.36.

Pour un potentiel analytiquement dilatable, on écrit (3.1.1) sous la forme

$$U_\mu P U_\mu^* = e^{-2\mu}(-h^2 \Delta) + [V(xe^\mu)(-h^2 \Delta + 1)^{-1}](-h^2 \Delta + 1),$$

ce qui définit pour μ complexe assez petit un opérateur non-borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, de domaine $H^2(\mathbb{R}^d)$. On note P_θ l'opérateur obtenu pour $\mu = i\theta$ avec $\theta \in \mathbb{R}^+$ assez petit, et on a immédiatement par le Théorème de Weyl (Proposition 1.4.34)

$$\sigma_{ess}(P_\theta) = e^{-2i\theta} \sigma_{ess}(-h^2 \Delta + e^{2i\theta} V(xe^{i\theta})) = e^{-2i\theta} \sigma_{ess}(-h^2 \Delta) = e^{-2i\theta} \mathbb{R}^+.$$

On peut maintenant définir les résonances de P :

Définition 3.1.2 Soit V un potentiel analytiquement dilatable dans $|\mu| < \delta$. Pour $0 < \theta < \theta(\delta)$ on note $\Gamma(\theta)$ le spectre discret de P_θ dans le secteur $\mathcal{S}_\theta = (0, \mathbb{R}^+, e^{-2i\theta} \mathbb{R}^+)$ du plan complexe. L'ensemble Γ des résonances de P est alors

$$\Gamma = \bigcup_{0 < \theta < \delta} \Gamma_\theta.$$

Bien qu'elle soit particulièrement simple, cette définition est peu satisfaisante dans la mesure où elle ne donne pas de renseignement sur la nature de de l'ensemble des résonances. On va voir en particulier qu'il s'agit d'un ensemble discret.

3.1.2 Prolongement méromorphe la résolvante

On s'intéresse maintenant à la résolvante de l'opérateur de Schrödinger $P = -h^2 \Delta + V$ où V est analytiquement dilatable, et supposé réel sur le réel, de sorte que $(H^2(\mathbb{R}^d), P)$ est un opérateur autoadjoint sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. Pour $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, la résolvante $R(z) = (P - z)^{-1}$ est bien définie comme opérateur borné de $L^2(\mathbb{R}^d)$ dans $H^2(\mathbb{R}^d)$, et $z \mapsto R(z)$ est une fonction analytique dans $\mathbb{C}^+ = \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Im} z > 0\}$. On va montrer que, sous l'hypothèse que V est

analytiquement dilatable, on peut prolonger cette fonction en une fonction méromorphe dans un domaine plus grand, dont l'ensemble des pôles sera précisément Γ .

Pour $\mu \in \mathbb{R}$ assez petit, puisque U_μ est unitaire, on remarque que pour $z \in \mathbb{C}^+$ et $u, v \in L^2$,

$$(3.1.2) \quad \langle R(z)u, v \rangle = \langle U_\mu R(z)u, U_\mu v \rangle = \langle (U_\mu R(z)U_\mu^*)U_\mu u, U_\mu v \rangle,$$

et l'on vérifie que $U_\mu R(z)U_\mu^* = R_\mu(z) = (P_\mu - z)^{-1}$. On va étendre la fonction $z \mapsto \langle R(z)u, v \rangle$ à un domaine plus grand de $\mathbb{C}$ en utilisant cette égalité pour μ complexe. La première difficulté à régler, c'est que $U_\mu u$ n'est en général pas défini pour $u \in L^2$ et $\mu \notin \mathbb{R}$. On est donc amené à travailler non pas sur L^2 , mais avec un ensemble de "vecteurs analytiques" :

Définition 3.1.3 Pour $\delta > 0$, on note $\mathcal{A}_\delta$ l'ensemble des fonctions analytiques sur $\mathbb{C}^d$ telles que

$$\exists \epsilon > 0, e^{\epsilon z^2} u(z) \rightarrow 0 \text{ quand } |z| \rightarrow \infty \text{ avec } |\arg(z)| < 2\delta.$$

Remarque 3.1.4 La terminologie "vecteur analytique" vient du fait que les résonances auxquelles on s'est intéressé en premier sont celles de l'opérateur de Schrödinger atomique, qui décrit le mouvement de n électrons autour de N noyaux de charge respective Z_j , dont la position est $X = (X_1, \dots, X_N) \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$H(X) = \left(\sum_{i=1}^n (h\partial_{x_i})^2 - \sum_{j=1}^N \frac{Z_j}{|x_i - X_j|} \right) + \sum_{1 \leq i < k \leq n} \frac{1}{|x_i - x_k|}.$$

Dans ce cadre, l'opérateur de Schrödinger agit sur des vecteurs à 3 composantes (les particules vivent dans $\mathbb{R}^3$) de fonctions de $L^2(\mathbb{R}^n)$.

On remarque d'abord que $\mathcal{A}_\delta \subset L^2(\mathbb{R}^d)$, que $U_{i\theta}\phi$ est bien défini pour $\phi \in \mathcal{A}_\delta$, et même que $U_{i\theta}\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ pourvu que $|\theta| < 2\delta$ avec δ assez petit :

$$|U_{i\theta}\phi(x)| = |\phi(e^{i\theta}x)| = e^{-\epsilon x^2 \cos(2\theta)} |e^{\epsilon(e^{i\theta}x)^2} \phi(e^{i\theta}x)|.$$

Ensuite, on est complètement rassuré par le

Lemme 3.1.5 L'ensemble $\mathcal{A}_\delta$ est dense dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, de même que $U_{i\theta}\mathcal{A}_\delta$ pour $|\theta| < 2\delta$ avec $\delta > 0$ assez petit.

Preuve: On commence par le premier point, avec $d = 1$. Soit $\psi \in (\mathcal{A}_\delta)^\perp$. Pour tout $k \in \mathbb{N}$ on a $(-ix\xi)^k e^{-x^2} \in \mathcal{A}_\delta$, donc pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$\int \sum_{k=0}^n \frac{(-ix\xi)^k}{k!} e^{-x^2} \overline{\psi(x)} dx = 0.$$

Le théorème de convergence dominée donne alors

$$\int e^{-ix\xi} e^{-x^2} \overline{\psi(x)} dx = 0,$$

d'où $\mathcal{F}(e^{-x^2} \overline{\psi(x)}) = 0$ et finalement $\psi = 0$. Le cas de la dimension d quelconque s'obtient par densité de $L^2(\mathbb{R}) \otimes \cdots \otimes L^2(\mathbb{R})$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Enfin pour $\theta \neq 0$, $\psi \in (U_{i\theta} \mathcal{A}_\delta)^\perp$ si et seulement si pour tout $\phi \in \mathcal{A}_\delta$,

$$0 = \langle \psi, U_{i\theta} \phi \rangle = \langle U_{-i\theta} \psi, \phi \rangle$$

i.e. $U_{-i\theta} \psi \in (\mathcal{A}_\delta)^\perp = \{0\}$. □

Remarque 3.1.6 *Ce lemme n'est autre que le Lemme 1.2.1 concernant le domaine de l'oscillateur harmonique.*

On étend maintenant la fonction $\mu \mapsto \langle R_\mu(z) U_\mu \phi, U_\mu \psi \rangle$ à μ complexe. On note d'abord qu'il existe un ouvert non-vidé $\Omega_\delta \subset \mathbb{C}^+$ tel que, pour tout $\mu \in \mathbb{C}$ avec $|\mu| < \delta$, Ω_δ ne rencontre pas le spectre de P_μ . En effet on peut écrire

$$P_\mu - z = e^{-2i\theta} (-h^2 \Delta) + V(xe^{i\theta}) - z = [1 + V(xe^{i\theta}) (e^{-2i\theta} (-h^2 \Delta - z)^{-1})] (e^{-2i\theta} (-h^2 \Delta) - z).$$

Le dernier facteur est inversible pour $z \in \mathbb{C} \setminus e^{-2i\theta} \mathbb{R}^+$, et le premier facteur est inversible pour $\text{Im } z$ assez grand : il s'écrit $I + K(z)$ avec $K(z)$ opérateur borné de norme $\leq C(\delta)/|\text{Im } z|$.

Lemme 3.1.7 *Soit $z \in \Omega_\delta$, et $R_\mu(z) = (P_\mu - z)^{-1}$. Pour tout $\phi, \psi \in \mathcal{A}_\delta$, la fonction $F_z : \mu \mapsto \langle R_\mu(z) U_\mu \phi, U_{\bar{\mu}} \psi \rangle$ est holomorphe dans $\{\mu \in \mathbb{C}, |\mu| < \delta\}$.*

Preuve: On a vu que si $z \in \Omega_\delta$, $R_\mu(z)$ est bien définie pour $|\mu| \leq \delta$. On va montrer que F est $\mathcal{C}^1$ par rapport à $\mu \in \mathbb{R}^2$, et vérifie $\partial_{\bar{\mu}} F = 0$. On note $\mu = \nu + i\theta$ et on calcule d'abord $\partial_\nu F$. La seconde formule de la résolvante donne

$$\begin{aligned} F(\nu + s, \theta) - F(\nu, \theta) &= (P_{\nu+s+i\theta} - z)^{-1} - (P_{\nu+i\theta} - z)^{-1} \\ &= (P_{\nu+s+i\theta} - z)^{-1} (P_{\nu+i\theta} - P_{\nu+s+i\theta}) (P_{\nu+i\theta} - z)^{-1}. \end{aligned}$$

Or on a

$$\begin{aligned} (P_{\nu+i\theta} - P_{\nu+s+i\theta}) &= (e^{\nu+i\theta} - e^{\nu+s+i\theta}) (-h^2 \Delta) + V(xe^{\nu+i\theta}) - V(xe^{\nu+s+i\theta}) \\ &= (-s + o(s)) [e^{\nu+i\theta} (-h^2 \Delta) + \nabla V(xe^{\nu+i\theta})]. \end{aligned}$$

Lorsque V est analytiquement dilatable, $\nabla V(xe^\mu) (P_\mu - z)^{-1}$ est un opérateur borné : en effet on peut écrire

$$\nabla V(xe^\mu) (P_\mu - z)^{-1} = \partial_\mu [V(xe^\mu) (-h^2 \Delta + 1)^{-1}] (-h^2 \Delta + 1) (P_\mu - z)^{-1}.$$

Du coup $F(\nu + s, \theta) - F(\nu, \theta) - s(P_{\nu+i\theta} - z)^{-1}(e^{\nu+i\theta}(-h^2\Delta) + \nabla V(xe^{\nu+i\theta}))(P_{\nu+i\theta} - z)^{-1} \rightarrow 0$ en norme quand $s \rightarrow 0$, et F est dérivable par rapport à ν . Le même calcul montre que F est dérivable par rapport à θ , et que $\partial_{\bar{\mu}}F(\mu) = 0$. $\square$

Maintenant on revient à (3.1.2), qui pour le moment n'est vraie que pour $\mu \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathbb{C}^+$:

$$\langle R(z)u, v \rangle = \langle R_{\mu}(z)U_{\mu}u, U_{\bar{\mu}}v \rangle.$$

Mais on vient de voir que pour $z \in \Omega_{\delta}$, le membre de droite de cette égalité est bien défini et holomorphe par rapport à $\mu \in \{|\mu| < \delta\}$. C'est également vrai pour le membre de gauche, puisqu'il ne dépend pas de μ . Ces deux fonctions holomorphes coïncident sur le réel, donc l'égalité est encore vraie dans $\{|\mu| < \delta\}$.

On fixe alors $\mu = i\theta$ avec $0 < \theta < \delta$, et on considère cette égalité entre fonctions de la variable z . Par définition, la fonction $z \mapsto R_{\theta}(z)$ est analytique dans $\mathbb{C} \setminus \sigma(P_{\theta})$. En fait, par définition même du spectre discret, on a le

Lemme 3.1.8 *La fonction $z \mapsto R_{\theta}(z)$ est une fonction méromorphe de type fini dans $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(P_{\theta}) = \mathbb{C} \setminus e^{-2i\theta}\mathbb{R}^+$. Ses pôles sont exactement les éléments de $\sigma_{disc}(P_{\theta})$.*

On reporte la preuve de ce lemme à la section suivante. On se contente pour l'instant de la

Définition 3.1.9 *Soit $(A_z)_{z \in \Omega}$ une famille d'opérateurs bornés, où Ω est un ouvert connexe de $\mathbb{C}$. On dit que (A_z) est une famille méromorphe de type fini s'il existe une ensemble discret $D \subset \Omega$ tel que (A_z) est holomorphe dans $\Omega \setminus D$, et pour tout $z_0 \in D$ il existe k opérateurs de rang fini $A_{-k}, A_{-k+1}, \dots, A_{-1}$ et famille analytique d'opérateurs bornés $\tilde{A}_z$ tels que*

$$A_z = \frac{A_{-k}}{(z - z_0)^k} + \dots + \frac{A_{-1}}{(z - z_0)} + \tilde{A}_z.$$

Comme conséquence de ce Lemme 3.1.8, on obtient le résultat principal de cette section :

Proposition 3.1.10 *Soit $\phi, \psi \in \mathcal{A}_{\delta}$. La fonction $z \mapsto \langle R(z)\phi, \psi \rangle$, définie sur $\mathbb{C}^+$, admet un prolongement méromorphe de type fini à $\{-2\delta < \arg(z) < \pi/2\}$.*

3.1.3 Projecteurs de Riesz et pôles de la résolvante

Soit $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un opérateur non-borné, fermé, et λ un point isolé du spectre de A . On note γ un chemin fermé simple inclus dans l'ensemble résolvant de A , tel que $\sigma(A) \cap \text{Int}(\gamma) = \{\lambda\}$.

Définition 3.1.11 *On appelle projecteur de Riesz associé à A et λ l'opérateur borné Π_{λ} défini par*

$$\Pi_{\lambda} = -\frac{1}{2i\pi} \oint_{\gamma} R_A(z) dz = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\gamma} (z - A)^{-1} dz.$$

On rassemble dans le lemme qui suit les principales propriétés de l'opérateur Π_λ :

Lemme 3.1.12 *Soit Π_λ le projecteur de Riesz associé à A et λ :*

1. Π_λ est un projecteur (pas forcément orthogonal) : $(\Pi_\lambda)^2 = \Pi_\lambda$, et

$$\text{Ker } \Pi_\lambda \oplus \text{Im } \Pi_\lambda = \mathcal{H}.$$

2. $\text{Im } \Pi_\lambda \subset \mathcal{D}_A$, Π_λ commute avec A , et $\text{Ker } \Pi_\lambda$ et $\text{Im } \Pi_\lambda$ sont stables par A .
3. $\text{Ker}(A - \lambda) \subset \text{Im } \Pi_\lambda$, et si A est autoadjoint, Π_λ est le projecteur orthogonal sur $\text{Ker}(A - \lambda)$.
4. Dans le cas où Π_λ est de rang fini, tout $u \in \text{Im } \Pi_\lambda$ est un vecteur propre généralisé pour A et λ , i.e. il existe $n \in \mathbb{N}$ tel que $(A - \lambda)^n u = 0$.

Preuve: 1. On note d'abord que Π_λ ne dépend que de la classe d'homotopie du chemin γ dans $\rho(A)$. On écrit donc

$$(\Pi_\lambda)^2 = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma R_A(z) \Pi_\lambda dz = -\frac{1}{4\pi^2} \oint_\gamma \oint_{\gamma'} R_A(z) R_A(z') dz' dz,$$

où γ' est un chemin fermé simple tel que $\gamma \subset \text{Int}(\gamma')$. A l'aide de la première formule de la résolvante on obtient

$$(\Pi_\lambda)^2 = -\frac{1}{4\pi^2} \oint_\gamma \oint_{\gamma'} \frac{1}{z' - z} (R_A(z) - R_A(z')) dz' dz,$$

et $(\Pi_\lambda)^2 = \Pi_\lambda$ puisque $\oint_{\gamma'} \frac{1}{z' - z} dz' = 0$ et $\oint_{\gamma'} \frac{R_A(z')}{z' - z} dz' = 2i\pi R_A(z)$.

2. Soit $\psi \in \text{Im } \Pi_\lambda$. On a $\psi = \Pi_\lambda \psi = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma R_A(z) \psi dz$. Par définition on a $R_A(z) \psi \in \mathcal{D}_A$ pour tout $z \in \gamma$, et il reste à montrer que c'est encore vrai pour l'intégrale, qui est définie comme limite de sommes de Riemann :

$$\oint_\gamma R_A(z) \psi dz = \lim_{n \rightarrow +\infty} \psi_n, \quad \psi_n = \sum_{j=1}^n \frac{1}{n} \gamma'(t_j^{(n)}) R_A(\gamma(t_j^{(n)})) \psi \in \mathcal{D}_A.$$

Or $AR_A(z) = I + zR_A(z)$, donc $A\psi_n$ est une somme de Riemann pour $\oint_\gamma (I + zR_A(z)) \psi dz$ et la suite $(A\psi_n)$ converge. Puisque A est fermé, cela entraîne que $\psi \in \mathcal{D}_A$.

On a d'ailleurs aussi montré que $A\Pi_\lambda \psi = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma zR_A(z) \psi dz = \Pi_\lambda A\psi$, et le reste du point 2 en découle facilement.

3. Supposons que $A\psi = \lambda\psi$. On a alors $(A - z)^{-1}\psi = (\lambda - z)^{-1}\psi$, donc $\Pi_\lambda\psi = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma (\lambda - z)^{-1}\psi dz = \psi$, et $\psi \in \text{Im } \Pi_\lambda$.

Supposons maintenant A autoadjoint, et $\psi = \Pi_\lambda\psi$. On a alors

$$(A - \lambda)\psi = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma (A - \lambda)R_A(z)\psi dz = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma (z - \lambda)R_A(z)\psi dz.$$

Or la fonction $z \mapsto (z - \lambda)R_A(z)$ est bornée dans un voisinage pointé de λ , puisque $\|R_A(z)\| \leq \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(A))}$. Puisqu'elle est analytique dans ce voisinage pointé, elle est analytique dans tout le voisinage, et $(A - \lambda)\psi = 0$.

4. Supposons $\dim \text{Im } \Pi_\lambda = d < +\infty$. L'opérateur $B = A|_{\text{Im } \Pi_\lambda} = \Pi_\lambda A \Pi_\lambda = A \Pi_\lambda$ est une matrice $d \times d$ dont la seule valeur propre est λ : si $B\psi = \mu\psi$, $R_A(z)\psi = (\mu - z)^{-1}\psi$ et $\psi = \Pi_\lambda\psi = 0$ dès que l'on peut choisir le contour γ autour de λ de sorte que $\mu \notin \text{Int}(\gamma)$, i.e. dès que $\mu \neq \lambda$. En écrivant la matrice B sous forme de Jordan, on voit donc que $(B - \lambda)^d = 0$. $\square$

Définition 3.1.13 *La multiplicité géométrique d'une valeur propre λ de A est la dimension de $\text{Ker}(A - \lambda)$. La multiplicité algébrique d'une valeur propre isolée λ de A est le rang de Π_λ . Le spectre discret de A est l'ensemble des valeurs propres isolées de multiplicité algébrique finie.*

Dans le cas d'un opérateur autoadjoint, le point 3 du Lemme 3.1.12 montre que les multiplicités algébriques et géométriques coïncident, et la définition ci-dessus est compatible avec celle donnée au Chapitre 1 (cf. la Définition 1.4.27).

On remarque aussi que tout ce qui précède est valable aussi en dimension finie. Dans ce cas Π_λ est toujours de rang fini, et Π_λ est la projection sur l'espace propre généralisé associé à λ . Dans le cas autoadjoint (symétrique) on a montré que les multiplicités géométrique et algébrique coïncident, i.e. que la matrice correspondante est diagonalisable.

Plus généralement, pour γ une courbe fermée simple incluse dans $\rho(A)$ on peut aussi définir

$$\Pi_\gamma = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma R_A(z) dz = \frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma (z - A)^{-1} dz.$$

Lemme 3.1.14 *L'opérateur Π_γ est un projecteur, et s'il est de rang fini N , l'intérieur de γ contient exactement N valeurs propres de A comptées avec leur multiplicité algébrique.*

Preuve: La relation $(\Pi_\gamma)^2 = \Pi_\gamma$ s'obtient comme dans le Lemme 3.1.12.

□ •

On peut maintenant lier les pôles du prolongement méromorphe de la résolvante construit dans la section précédente aux résonances définies par dilatation analytique :

Proposition 3.1.15 *Soit V un potentiel analytiquement dilatable dans $|\mu| < \delta$. Pour tout $\theta \in]0, \delta]$ on a*

$$\sigma_{disc}(P_\theta) = \bigcup_{\phi, \psi \in \mathcal{A}_\delta} \{ \text{pôles de } z \mapsto \langle R(z)\phi, \psi \rangle \} \cap \{z \in \mathbb{C}, -2\theta < \arg z < \pi/2\}.$$

Preuve: Soit d'abord $z_0 \in \{z \in \mathbb{C}, -2\theta < \arg z < \pi/2\}$ un pôle de $\langle R(z)\phi, \psi \rangle$ pour $\phi, \psi \in \mathcal{A}_\delta$. On a nécessairement $\text{Im } z < 0$, et on peut trouver un contour fermé simple γ tel que $z_0 \in \text{Int}(\gamma) \subset \mathbb{C}^-$. Il existe $N \in \mathbb{N}$ tel que

$$\oint_\gamma (z - z_0)^N \langle R(z)\phi, \psi \rangle dz \neq 0,$$

ou encore,

$$\langle \oint_\gamma (z - z_0)^N R_\theta(z) dz U_\theta \phi, U_{-\theta} \psi \rangle = \langle (P_\theta - z_0)^N \oint_\gamma R_\theta(z) dz U_\theta \phi, U_{-\theta} \psi \rangle \neq 0,$$

et donc $\oint_\gamma R_\theta(z) dz \neq 0$, ce qui montre que $z \mapsto (P_\theta - z)^{-1}$, qui est méromorphe de type fini dans $\{z \in \mathbb{C}, -2\theta < \arg z < \pi/2\}$, admet des pôles de multiplicité algébrique finie dans $\text{Int}(\gamma)$. Puisque γ est quelconque autour de z_0 , ces pôles sont tous en z_0 , et on a bien $z_0 \in \sigma_{disc}(P_\theta)$.

Réciproquement, supposons que $z_0 \in \sigma_{disc}(P_\theta)$ pour un $\theta \in]0, \delta[$. Il existe $u \in L^2(\mathbb{R}^d)$ tel que $\|u\| = 1$ et $P_\theta u = z_0 u$. On note

$$\Pi_\theta = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma (P_\theta - z)^{-1} dz,$$

où γ est un contour fermé simple dans $\rho(P_\theta)$ tel que $\text{Int}(\gamma) \cap \sigma(P_\theta) = \{z_0\}$. Puisque $\text{Ker}(P_\theta - z) \subset \text{Im } \Pi_\theta$, on a $\langle \Pi_\theta u, u \rangle = 1$. Par densité, pour tout $\epsilon > 0$, on peut trouver $u_\epsilon \in U_\theta \mathcal{A}_\delta$ et $v_\epsilon \in U_{-\theta} \mathcal{A}_\delta$ tels que $\|u - u_\epsilon\| + \|v - v_\epsilon\| \leq \epsilon$. Puisque $(P_\theta - z)^{-1}$ est une famille uniformément bornée pour $z \in \gamma$, on peut choisir $\epsilon > 0$ assez petit pour que

$$-\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma \langle R(z)u_\epsilon, v_\epsilon \rangle dz = -\frac{1}{2i\pi} \oint_\gamma \langle (P_\theta - z)^{-1} u_\epsilon, v_\epsilon \rangle dz \neq 0.$$

Donc $z \mapsto \langle (P_\theta - z)^{-1} u_\epsilon, v_\epsilon \rangle$ admet un pôle à l'intérieur de γ , et puisque γ est arbitraire, ce ne peut être que z_0 . □

Par conséquent, Γ l'ensemble des résonances de P dans $\{z \in \mathbb{C}, -2\delta < \arg z < \pi/2\}$ est

$$\Gamma = \bigcup_{\phi, \psi \in \mathcal{A}_\delta} \{ \text{pôles de } z \mapsto \langle R(z)\phi, \psi \rangle \} \cap \{z \in \mathbb{C}, -2\delta < \arg z < \pi/2\}.$$

Notons que l'on a aussi montré que, pour $0 < \theta' < \theta < \delta$, $\Gamma_\theta \cap \mathcal{S}_{\theta'} = \Gamma_{\theta'}$.

Index

champ hamiltonien, 4

énergie, 5

moment, 4

potentiel, 5

Schrödinger
opérateur, 6

Transformée de FBI
d'une gaussienne, 37

Bibliographie

- [1] J. AGUILAR AND J. M. COMBES, *A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger Hamiltonians*, Comm. Math. Phys., 22 (1971), pp. 269–279.
- [2] J.-F. BONY AND L. MICHEL, *Microlocalization of resonant states and estimates of the residue of the scattering amplitude*, Comm. Math. Phys., (2004).
- [3] N. BURQ AND M. ZWORSKI, *Geometric control in the presence of a black box*, J. Amer. Math. Soc., 17 (2004), pp. 443–471 (electronic).
- [4] C. COHEN-TANOUDJI, *Mécanique Quantique*, vol. I,II.
- [5] R. DAUTRAY AND J.-L. LIONS, *Analyse Numérique et Calcul Scientifique*, Masson, 1988.
- [6] M. DIMASSI AND J. SJÖSTRAND, *Spectral Asymptotics in the semi-classical limit*, no. 268 in London mathematical Society Lecture Notes, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [7] S. FLÜGGE, *Practical quantum mechanics*, Classics in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, english ed., 1999. Translated from the 1947 German original.
- [8] S. FUJIIÉ AND T. RAMOND, *Matrice de scattering et résonances associées à une orbite hétérocline*, Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor., 69 (1998), pp. 31–82.
- [9] ———, *Breit-Wigner formula at barrier tops*, J. Math. Phys., 44 (2003), pp. 1971–1983.
- [10] C. GÉRARD AND J. SJÖSTRAND, *Semiclassical resonances generated by a closed trajectory of hyperbolic type*, Communication in Mathematical Physics, 108 (1987), pp. 391–421.
- [11] B. HELFFER, *Semi-classical analysis for the Schrödinger operator and applications*, vol. 1336 of Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [12] ———, *Théorie spectrale*, 2001.
- [13] B. HELFFER AND J. SJÖSTRAND, *Résonances en limite semiclassique*, Bull. Soc. Math. France, Mémoire 24-25 (1985).
- [14] P. D. HISLOP AND I. M. SIGAL, *Introduction to spectral theory*, vol. 113 of Applied Mathematical Sciences, Springer-Verlag, New York, 1996. With applications to Schrödinger operators.

- [15] L. HÖRMANDER, *The analysis of linear partial differential operators. I*, vol. 256 of Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], Springer-Verlag, Berlin, second ed., 1990. Distribution theory and Fourier analysis.
- [16] W. HUNZIKER, *Distortion analyticity and molecular resonance curves*, Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor., 45 (1986), pp. 339–358.
- [17] A. LAHMAR-BENBERNOU AND A. MARTINEZ, *On helffer-sjöstrand theory of resonances*, Int. Math. Res. Not., 13 (2002), pp. 697–717.
- [18] L. LANDAU AND E. LIFSCHITZ, *Physique théorique (“Landau-Lifchitz”). Tome III : Mécanique quantique. Théorie non relativiste*, Éditions Mir, Moscow, 1967. Deuxième édition, Traduit du russe par Édouard Gloukhian.
- [19] P. LEVY-BRUHL, *Théorie spectrale*.
- [20] A. MARTINEZ, *An introduction to semiclassical and microlocal analysis*, Universitext, Springer-Verlag, New York, 2002.
- [21] A. MESSIAH, *Mécanique quantique*, 2 vols, Dunod, Paris, 1959.
- [22] T. RAMOND, *Semiclassical study of quantum scattering on the line*, Comm. Math. Phys., 177 (1996), pp. 221–254.
- [23] D. ROBERT, *Autour de l’approximation semi-classique*, vol. 68 of Progress in Mathematics, Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1987.
- [24] J. SJÖSTRAND, *Singularités analytiques microlocales*, in Astérisque 95, Société Mathématique de France, 1982.