

**PUBLICATIONS**

**MATHEMATIQUES**

**D'ORSAY**

81.09

SPECTRE DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER  
ET METHODE BKW

A. VOROS<sup>\*</sup>

\* André VOROS  
Service de Physique Théorique  
CEN Saclay  
91191 GIF SUR YVETTE CEDEX  
FRANCE

Université de Paris-Sud  
Département de Mathématique  
Bât. 425  
91405 ORSAY France

*Code Matière AMS (1980) 34.E.20 - 35.J.10*  
*35.P.20 - 81.C.05*

**PUBLICATIONS**

**MATHEMATIQUES**

**D'ORSAY**

81.09

SPECTRE DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER  
ET METHODE BKW

A. VOROS<sup>\*</sup>

\* André VOROS  
Service de Physique Théorique  
CEN Saclay  
91191 GIF SUR YVETTE CEDEX  
FRANCE

Université de Paris-Sud  
Département de Mathématique  
Bât. 425  
91405 ORSAY France

## AVANT-PROPOS

Ces notes résument un cours enseigné au Département de Mathématiques de l'Université Paris-Sud (Orsay) en 1980-1981 et, sous forme abrégée, au Département de Mathématiques de l'École Normale Supérieure (rue d'Ulm) en 1979.

Le sujet est très classique : la théorie spectrale des opérateurs différentiels ordinaires du second ordre, ou théorie de Sturm-Liouville. Nous pensons que cette théorie, actuellement peu enseignée, mérite d'être réhabilitée pour au moins deux raisons :

- L'avènement de la mécanique quantique depuis 1927 a fait beaucoup progresser le sujet, à la fois sur le plan théorique et sur le plan pratique (numérique), ces deux aspects étant étroitement liés. En effet l'équation de Schrödinger des états quantiques stationnaires est de type Sturm-Liouville dans le cas unidimensionnel. Nous décrirons surtout la méthode d'approximation de Brillouin-Kramers-Wentzel (BKW), dont le principe remonte à Liouville et Green mais qui doit son état d'avancement actuel aux problèmes apparus en mécanique quantique et aux idées physiques dont celle-ci est porteuse.

- Des généralisations multidimensionnelles de la méthode BKW (théorie de Maslov, opérateurs intégraux de Fourier) soulèvent actuellement un grand intérêt. Mais ces théories très puissantes requièrent un long travail d'approche d'une part, et d'autre part leur présentation très générale et abstraite tend à masquer au profane le fait que leur portée réelle dépend fortement du problème considéré. En particulier il y a une différence énorme entre les spectres d'un opérateur différentiel ordinaire (dimension  $n=1$ ) et aux dérivées partielles ( $n>1$ ) : ainsi la répartition des valeurs propres est très régulière dans le premier cas, irrégulière dans le second. Ce "petit détail" (d'un point de vue abstrait) devient capital si (et seulement si) on cherche à calculer effectivement, fût-ce très grossièrement, les dites valeurs propres. Or il signifie qu'on doit pouvoir faire une théorie spectrale beaucoup plus raffinée en se limitant à une dimension.

Nous cherchons donc à mettre en valeur dans ces notes d'un côté l'apport de la mécanique quantique, et d'un autre côté la spécificité du cas unidimensionnel. Nous en profiterons pour rester à un niveau accessible et concret, qui serait difficile à maintenir à plusieurs dimensions ; nos raisonnements seront beaucoup plus

descriptifs (voire heuristiques) que mathématiquement rigoureux, et nous renverrons à la bibliographie en fin de texte pour tous détails ou compléments, afin de nous limiter aux idées essentielles.

Plan sommaire :

I. Introduction générale

II-III. Théorie classique de Sturm-Liouville

IV-V. La méthode BKW et ses variantes avec applications.

## I - INTRODUCTION GENERALE

L'équation différentielle linéaire du 1er ordre :

$$\varphi' = Q(x)\varphi \quad (I.1)$$

est soluble par quadratures :

$$\varphi(x) = C \exp \int^x Q(y)dy \quad (I.2)$$

L'équation similaire du 2ème ordre :

$$\varphi'' = Q(x)\varphi \quad (I.3)$$

ne l'est plus (id. pour les ordres supérieurs).

Rappel : l'équation linéaire homogène générale  $p(x)\psi'' + q(x)\psi' + r(x)\psi = 0$  se ramène à (I.3) en posant  $\varphi(x) = \psi(x) \exp \frac{-1}{2} \int^x \frac{q(y)}{p(y)} dy$ .

Par analogie avec la factorisation des équations algébriques, on aimerait remplacer (I.3) par l'une ou l'autre des équations :

$$\varphi' = \pm \sqrt{Q(x)}\varphi \quad (I.4)$$

d'où l'on déduirait :

$$\varphi = C_+ \exp \int^x Q(y)dy + C_- \exp - \int^x Q(y)dy \quad (I.5)$$

( $C_{\pm}$  constantes d'intégration arbitraires). Cette substitution, exacte si et seulement si  $Q$  est constant, est en fait une excellente approximation si les variations de  $Q$  peuvent être négligées en un sens à préciser, et c'est le point de départ d'un développement des solutions en approximations successives : cela s'appelle suivant le contexte la méthode eikonale, ou bien de Liouville-Green, ou BKW (Brillouin-Kramers-Wentzel) en mécanique quantique. Le cours vise à décrire la structure de ces approximations et à appliquer ces méthodes au calcul du spectre de valeurs propres du problème (I.3). Ce traitement se fera dans le cadre et avec le langage de la mécanique quantique, dont l'équation fondamentale (équation de Schrödinger indépendante du temps) a la forme (I.3) ; l'approximation (I.5) s'interprète alors comme la limite semi-clas-

sique ( $\hbar \rightarrow 0^+$ ,  $\hbar$  = constante de Planck) de la mécanique quantique.

Notations de la mécanique quantique : l'état d'une particule en mouvement dans l'espace  $\mathbb{R}^n$  est décrit à tout instant  $t$  par un vecteur d'état  $\psi_t \in L^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)$ ,  $|\psi_t(\vec{x})|^2 dx$  étant la densité de probabilité de présence de la particule en  $x \in \mathbb{R}^n$  ; toutefois deux vecteurs proportionnels ( $\psi' = \lambda\psi$ ,  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ ) sont physiquement indiscernables (décrivent le même état). L'évolution du système dans le temps sous l'action d'un champ de forces dérivant d'un potentiel ( $F = -\text{grad } V$ ) obéit à l'équation de Schrödinger dépendant du temps ( $m$  = masse de la particule) :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_t + V\psi_t \quad (\text{I.6})$$

En vertu de ce qui précède, cet état est stationnaire (indépendant du temps) ssi  $\psi_t(\vec{x}) \equiv \theta(t) \psi(\vec{x})$ ,  $\theta(t) \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$  : ce n'est compatible avec (I.6) que si  $\theta(t) = \exp(-i\lambda t/\hbar)$  et alors

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi = \lambda\psi \quad (\text{I.7})$$

dite équation de Schrödinger stationnaire. C'est une équation aux valeurs propres que nous étudierons dans le cas idéalisé du mouvement à une dimension ( $n=1$ ) ; elle a alors la forme (I.3) avec  $Q = 2m(V-\lambda)/\hbar^2$  (certains problèmes à 3 dimensions avec symétries se ramènent en fait à (I.7) après séparation des variables). La relation de Planck entre énergie et fréquence ( $E = h\nu = (2\pi\hbar)\nu$ ) conduit à interpréter  $\lambda$  comme l'énergie constante dans le temps) de l'état stationnaire  $\psi$ , puisque la fréquence d'oscillation de  $\psi_t$  est  $\lambda/2\pi\hbar$ .

Pour une justification poussée du formalisme quantique, voir le livre de Mackey (chapitre 2) ; la principale rupture avec la mécanique newtonienne réside dans la description des états d'un système par les vecteurs d'un espace de Hilbert complexe séparable  $\mathcal{H} = L^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)$ .

## II - THEORIE CLASSIQUE DE STURM-LIOUVILLE (début)

Ce chapitre décrit les résultats qualitatifs fournis par :

1) l'analyse fonctionnelle abstraite appliquée à l'opérateur linéaire

$$\hat{H} = - \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (V \text{ supposée continue pour simplifier}) ;$$

2) la théorie de Sturm-Liouville, qui conduit à des résultats plus fins mais qui est spécifique du cas à 1 variable considéré ici.

### 1. Résultats d'analyse fonctionnelle générale\*

La raison d'être de l'opérateur  $\hat{H} = - \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$  est d'engendrer l'évolution dans le temps de l'état quantique, c'est-à-dire de résoudre (abstraitemment) le problème de Cauchy (I.6) dans l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  :

$$\frac{i\partial}{\partial t} \psi_t = \hat{H}\psi_t \quad \psi(0) = \psi_0 \in \mathcal{H}$$

à savoir :

$$\psi(t) = U(t)\psi_0 \quad , \quad U(t) = \exp(-it \hat{H}) \quad (\text{II.1})$$

L'idée physique de conservation de la probabilité totale implique  $\|\psi(t)\| = \|\psi_0\|$  ( $\forall t$ ) ; on en déduit que  $U(t)$  doit être un groupe à un paramètre d'opérateurs unitaires (cf. livre de Mackey). Si  $\mathcal{H}$  était de dimension finie ( $\mathcal{H} = \mathbb{C}^k$ ) la condition d'unitarité de  $U$  se traduirait par :

$$\forall \psi, \varphi \in \mathcal{H} \quad : \quad \langle \hat{H}\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, \hat{H}\varphi \rangle \quad (\text{II.2})$$

à savoir :  $\hat{H}$  hermitique ; alors  $\hat{H}$  aurait toutes ses valeurs propres réelles, ce qui est requis pour leur interprétation physique de niveaux d'énergie.

Malheureusement ce qui précède ne s'étend à  $\dim \mathcal{H} = \infty$  que pour un opérateur

---

\* Ce paragraphe se lit aussi pour un nombre quelconque de variables ( $\vec{x}=(x_1, \dots, x_n)$ ).



$\hat{H}$  borné, à savoir  $\|\hat{H}\| < \infty$ , où :

$$\|\hat{H}\| = \sup_{\psi \neq 0} \frac{\|\hat{H}\psi\|}{\|\psi\|} \quad (\text{II.3})$$

Or l'opérateur de Schrödinger, comme tout opérateur différentiel, est non borné. Nous rappelons quelques notions de base sur les opérateurs non bornés (voir Reed-Simon, chapitre 8-9; Dunford-Schwartz II chapitre 12) : un tel opérateur, s'il est fermé (ce sera toujours le cas), ne peut agir sur tous les vecteurs  $\psi \in \mathcal{X}$  ; la donnée de  $\hat{H}$  doit donc être accompagnée d'un domaine de définition  $D(\hat{H})$ , sous-espace linéaire dense dans  $\mathcal{X}$  mais distinct de  $\mathcal{X}$ . L'adjoint de  $\hat{H}$  est l'opérateur (non borné)  $\hat{H}^+$  défini par l'identité :

$$\langle \hat{H}^+ \varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, \hat{H}\psi \rangle \quad \forall \psi \in D(\hat{H}) \quad (\text{II.4})$$

son domaine  $D(\hat{H}^+)$  étant précisément l'espace des  $\varphi \in \mathcal{X}$  tels que la fonctionnelle linéaire  $\psi \in D(\hat{H}) \rightarrow \langle \varphi, \hat{H}\psi \rangle \in \mathbb{C}$  soit continue sur  $D(\hat{H})$ .

Un autre problème en dimension infinie, que l'opérateur  $\hat{H}$  soit borné ou non, est la nature du spectre  $\sigma(\hat{H})$ . Comme en dimension finie (où le spectre est l'ensemble des valeurs propres) on pose  $\sigma(\hat{H}) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid (\hat{H} - \lambda \mathbf{1}) : D(\hat{H}) \rightarrow \mathcal{X} \text{ non bijectif}\}$ . En particulier :

$$(\hat{H} - \lambda \mathbf{1}) \text{ non injectif} \iff \hat{H}\psi = \lambda\psi \text{ admet des solutions } \psi \in D(\hat{H}) \setminus \{0\},$$

et on retrouve la notion de valeur propre  $\lambda$  et de vecteur propre  $\psi$ .

Mais si  $\dim \mathcal{X} = \infty$ ,  $(\hat{H} - \lambda \mathbf{1})$  peut être injectif sans être surjectif ; les points correspondants du spectre peuvent couvrir des parties continues de  $\mathbb{C}$  (notion de spectre continu).

Physiquement le spectre  $\hat{H}$  donne les valeurs permises de l'énergie du système, on veut donc  $\sigma(\hat{H}) \subset \mathbb{R}$ . Ces valeurs peuvent aussi bien être des valeurs propres de  $\hat{H}$  (typiquement discrètes) que des points du spectre continu ; mais ce cours s'intéressera uniquement, du point de vue des applications, au calcul des valeurs propres, et nous essaierons d'éviter l'apparition d'autres types de points dans  $\sigma(\hat{H})$ .

Théorème :  $\{U(t) = \exp -it\hat{H}\}$  est un groupe à un paramètre d'opérateurs unitaires  $\Leftrightarrow \hat{H}^\dagger = \hat{H}$  (avec  $D(\hat{H}^\dagger) = D(\hat{H})$ ).

On dit alors que l'opérateur  $\hat{H}$  est auto-adjoint. Mais les deux conditions sont aussi difficiles à vérifier l'une que l'autre. L'argument classique (cf. Reed-Simon, tomes I et II) consiste à considérer d'abord  $\hat{H} = -d^2/dx^2 + V$  restreint à un domaine  $D_0$  dense mais assez simple (si  $V$  est continue on peut prendre  $D_0(\hat{H}) = C_0^\infty(\mathbb{R})$ ), en essayant d'obéir à deux conditions :

$$a) \forall \psi, \varphi \in D_0(\hat{H}) : \langle \hat{H}\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, \hat{H}\varphi \rangle \quad (\text{II.5})$$

(on dit que  $\hat{H}$  est symétrique sur  $D_0$ ).

$$b) \text{ L'équation } -\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = i\psi \text{ n'admet pas de solutions } \psi \in D((\hat{H}|_{D_0})^\dagger)$$

autres que 0.

Si a) + b) on dit que  $\hat{H}$  est essentiellement auto-adjoint (e.s.a) sur  $D_0$  ; alors on montre que  $\hat{H}|_{D_0}$  s'étend de manière unique (par fermeture) en un opérateur auto-adjoint (qu'on note encore  $\hat{H}$ ) et que  $D_0$  est dense dans  $D(\hat{H})$ .

Réciproquement, tout  $\hat{H}$  auto-adjoint vérifie a) + b) (avec  $D_0 = D$ ), et aussi :

$$c) \sigma(\hat{H}) \subset \mathbb{R}.$$

Dans la pratique on cherche donc à vérifier a) et b). Une intégration par parties montre que a)  $\Leftrightarrow V$  est à valeurs réelles ; b) est plus délicat à obtenir, et dépend des singularités et du comportement à l'infini de la fonction  $V$ . La littérature moderne donne des quantités de conditions suffisantes sur  $V$  en termes d'espaces fonctionnels ; nous décrirons un critère géométrique dû à Weyl, beaucoup plus ancien et plus simple, mais qui ne marche qu'à une variable (§.3).

## 2. Théorie de Sturm-Liouville

On reprend l'équation aux valeurs propres  $\hat{H}\psi = \lambda\psi$  sous la forme :

$$\varphi'' = Q(x)\varphi \quad (Q(x) = V(x) - \lambda) \quad (\text{II.6})$$

Théorème : Si  $Q : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  est une fonction continue, l'ensemble des solutions de (II.6) est un espace vectoriel de dimension 2 dans  $C^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ .

Preuve : (II.6) est équivalent à un système du 1er ordre :

$$\phi' = M(x) \phi \quad \phi \in \mathbb{C}^2, M \in GL(2, \mathbb{C}) \quad (\text{II.7})$$

Par exemple :  $\phi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi' \end{pmatrix}$ ,  $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ Q & 0 \end{pmatrix}$ .

On pose le problème de Cauchy :  $\phi(0) = \phi_0$ . Le théorème de Cauchy-Kowalewska affirme l'existence et l'unicité locales d'une solution  $\phi$  de classe  $C^1$ . Parce que (II.7) est linéaire, on peut rendre le résultat global, et le théorème en découle. La technique consiste à écrire une équation intégrale équivalente au problème de Cauchy, par ex. pour  $x > 0$  :

$$\phi(x) = \phi_0 + \int_0^x M(y) \phi(y) dy \quad (\text{II.8})$$

On résout formellement par itération :

$$\phi(x) = \phi_0 + \int_0^x M(x_1) dx_1 \phi_0 + \int_0^x M(x_1) dx_1 \int_0^{x_1} M(x_2) dx_2 \phi_0 + \dots \quad (\text{II.9})$$

Si cette série converge elle est solution du problème. Mais :

$$\left\| \int_0^x dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \dots \int_0^{x_{n-1}} dx_n M(x_1) \dots M(x_n) \right\| \ll \frac{x^n N^n}{n!} \text{ où } N = \sup_{0 \leq y \leq x} \|M(x)\|$$

donc  $\|\phi(x)\| \ll e^{N|x|} \|\phi_0\|$  . CQFD .

La convergence est même uniforme en  $\lambda$ , donc  $\phi$  est fonction entière de  $\lambda$ . La formule (II.9) définit un opérateur linéaire inversible qui transporte la donnée en 0 sur la donnée en  $x$  :  $\phi(x) = \tilde{F}(x,0) \phi_0$  :

$$\tilde{F}(x,0) = \mathbf{1} + \int_0^x M(x_1) dx_1 + \frac{1}{2} \iint_0^x dx_1 dx_2 T(M(x_1)M(x_2)) + \dots$$

(notation) =  $T \exp \int_0^x M(x) dx$

où T indique que tous les produits de matrices s'effectuent dans l'ordre décroissant

des arguments. On définit de même (pour  $x > y$ ) :

$$\tilde{F}(x,y) = T \exp \int_y^x M(z) dz \quad \text{et} \quad \tilde{F}(y,x) = \tilde{F}(x,y)^{-1} . \quad (\text{II.10})$$

On a alors la formule de transitivité :

$$\tilde{F}(x,y) \tilde{F}(y,z) = \tilde{F}(x,z) \quad \forall (x,y,z) .$$

Exercices :

a)  $\tilde{F}$  est la solution du problème de Cauchy matriciel :

$$\frac{\partial \tilde{F}}{\partial x}(x,y) = M(x) \tilde{F}(x,y) \quad , \quad \tilde{F}(x,x) = \mathbf{1} \quad (\text{II.11})$$

(comparer (II.10) à (I.2)).

b) déduire de (II.11) que  $D(x,y) = \det \tilde{F}(x,y)$  vérifie :

$$\frac{\partial D}{\partial x}(x,y) = \text{Tr } M(x) \cdot D(x,y) \quad (\text{II.12})$$

et donc que  $D(x,y) \equiv 1$  pour le problème (II.7).

c) (Approximation de Riemann) :

$$\tilde{F}(x,y) = \lim_n E_1 E_2 \dots E_n \quad (\text{produit ordonné !})$$

pour l'équipartition  $x = x_0 > x_1 > \dots > x_n = y$ , avec  $E_j = \exp \left[ \left( \frac{x-y}{n} \right) \cdot M(x_j) \right]$

Relations fondamentales : On définit le Wronskien de deux fonctions  $\in C^1$  :

$$W_x(\psi_1, \psi_2) = (\psi_1 \psi_2' - \psi_2 \psi_1')(x) \quad (\text{II.13})$$

Soit  $]a', b' [$  un intervalle fini et  $\psi_1, \psi_2 \in L^2(]a', b' [)$  ainsi que leurs dérivées jusqu'à l'ordre 2. Une intégration par parties produit la formule de Green :

$$W(\psi_1, \psi_2) \Big|_{a'}^{b'} = \int_{a'}^{b'} (\psi_1 \psi_2'' - \psi_2 \psi_1'') dx . \quad (\text{II.14})$$

Si ces fonctions vérifient les équations :

$$\psi_1'' = Q_1 \psi_1 \quad \text{et} \quad \psi_2'' = Q_2 \psi_2$$

alors :

$$W(\psi_1, \psi_2) \Big|_{a'}^{b'} = \int_{a'}^{b'} (Q_2 - Q_1) \psi_1 \psi_2 \, dx \quad (\text{II.15})$$

Cas particuliers :

$$\text{si} \quad Q_j = V - \lambda_j : W(\psi_1, \psi_2) \Big|_{a'}^{b'} = (\lambda_1 - \lambda_2) \int_{a'}^{b'} \psi_1 \psi_2 \, dx \quad (\text{II.16})$$

si  $\lambda_1 = \lambda, \lambda_2 = \lambda^*, \psi_1 = \psi, \psi_2 = \psi^*$  ( $V$  étant réel) :

$$W(\psi, \psi^*) \Big|_{a'}^{b'} = 2i \operatorname{Im} \lambda \int_{a'}^{b'} |\psi|^2 \, dx \quad (\text{II.17})$$

Par exemple, deux solutions de la même équation ont leur Wronskien  $W$  constant d'après (II.15) (et  $W=0$  ssi elles sont linéairement dépendantes).

Le problème aux limites dans un intervalle fini  $]a, b[$  : On prend des conditions aux limites homogènes du type :

$$\frac{\psi'(a)}{\psi(a)} = \alpha \quad \frac{\psi'(b)}{\psi(b)} = \beta \quad \alpha, \beta \in \overline{\mathbb{C}} \quad (\text{II.18})$$

Cas particuliers :  $\alpha = 0$  : condition de Neumann  
 $\infty$  : condition de Dirichlet } au point  $a$ .

Deux fonctions vérifient la même condition aux limites en  $a \iff W_a(\psi_1, \psi_2) = 0$ . On va montrer que  $\hat{H} = -d^2/dx^2 + V(x)$  définit un opérateur auto-adjoint si  $V$  est réel et si l'on met des conditions aux limites réelles. (II.14) implique :

$$W(\psi_1, \psi_2^*) \Big|_a^b = \langle \psi_2, \hat{H} \psi_1 \rangle - \langle \hat{H} \psi_2, \psi_1 \rangle \quad (\text{II.19})$$

On pose  $D(\hat{H}) = \{ \psi \in L^2(]a, b[) \mid \psi', \psi'' \in L^2 \text{ et } \psi \text{ vérifie (II.18) avec } \alpha, \beta \in \overline{\mathbb{R}} \}$ .

Alors  $\forall \psi_1, \psi_2 \in D(\hat{H}) : W(\psi_1, \psi_2^*) \Big|_a^b = 0$  donc  $\hat{H}$  est symétrique sur son domaine. De plus  $\langle \psi_2, H\psi_1 \rangle$  n'a la forme  $\langle \eta, \psi_1 \rangle$  que pour  $\psi_2 \in D(\hat{H})$  d'après (II.19) donc  $D(\hat{H}^\dagger) = D(\hat{H})$ , d'où  $H^\dagger = H$ . CQFD.

Remarque : si  $\psi_1, \psi_2 \in D(\hat{H})$  sont vecteurs propres associés aux valeurs propres  $\lambda_1 \neq \lambda_2$ , (II.16) implique  $\psi_1 \perp \psi_2$  (noter encore le rôle des conditions aux limites).

### 3. Le critère de Weyl

La situation se gâte si une des bornes de l'intervalle tend vers  $\infty$  (ou bien si la fonction  $Q$  tend vers l'infini à cette borne). On va traiter l'exemple  $a=0$  fixe,  $b \rightarrow +\infty$  (les autres cas se traitent de même).

On regarde l'équation (II.6) pour  $\lambda \in \mathbb{R}$ , par exemple  $\text{Im } \lambda > 0$ . Soit une base de solutions définie par les données de Cauchy en  $a=0$  :

$$\begin{cases} \theta(0) = 1 \\ \theta'(0) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \varphi(0) = 0 \\ \varphi'(0) = 1 \end{cases} \quad \Rightarrow W(\theta, \varphi) \equiv 1 . \quad (\text{II.20})$$

Autrement dit, la matrice  $\begin{pmatrix} \theta(x) & \varphi(x) \\ \theta'(x) & \varphi'(x) \end{pmatrix}$  coïncide avec  $\tilde{F}(x, 0)$  : voir l'équ. (II.11).

On étudie alors comment une condition aux limites en  $x = b : \frac{\psi'}{\psi}(b) = z \in \mathbb{C}$  se répercute au point  $x = 0$  :

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = \tilde{F}(x, 0)^{-1} \begin{pmatrix} \psi(b) \\ \psi'(b) \end{pmatrix}$$

L'application  $z = \frac{\psi'}{\psi}(b) \rightarrow \ell = \frac{\psi'}{\psi}(0)$  est homographique, donc l'image de l'axe réel  $\{z \in \mathbb{R}\}$  est un cercle qu'on va chercher à préciser (pour le moment,  $b$  et  $\lambda$  sont fixés, seul  $z$  varie). L'équation du demi-plan supérieur  $\{\text{Im } z > 0\}$  peut s'écrire :

$$\text{Im } \frac{\psi'}{\psi}(b) > 0 \iff (2i)^{-1} W_b(\psi, \psi^*) < 0 \quad (\text{II.21})$$

et en utilisant (II.17) :

$$\operatorname{Im} \lambda \int_0^b |\psi|^2 dx + (2i)^{-1} W_0(\psi, \psi^*) < 0$$

Avec la normalisation  $\psi = \theta + \lambda \varphi$  (cf. (II.20)), nous obtenons :

$$\int_0^b |\psi|^2 dx = \int_0^b |\theta + \lambda \varphi|^2 dx < \operatorname{Im} \lambda / \operatorname{Im} \lambda \quad (\text{II.22})$$

qui représente l'équation de l'image du demi-plan  $\{\operatorname{Im} z > 0\}$  dans le plan  $\lambda$ .

Une autre forme utile s'obtient en repartant de (II.21) :

$$(2i)^{-1} \left[ W_b(\varphi, \varphi^*) |\lambda|^2 + 2 \operatorname{Re}(W_b(\theta, \varphi^*) \lambda^*) + W_b(\theta, \theta^*) \right] < 0$$

qui, grâce à la relation tirée de (II.17) pour  $\varphi$  :

$$W_b(\varphi, \varphi^*) = 2i \operatorname{Im} \lambda \int_0^b |\varphi|^2 dx \quad (\text{II.23})$$

devient :  $|\lambda - \lambda_0|^2 < r^2$ , équation du disque de centre  $\lambda_0 = -W_b(\theta; \varphi^*) / W_b(\varphi, \varphi^*)$  et de rayon :

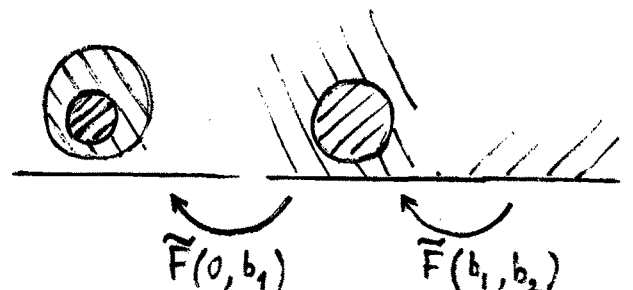
$$\begin{aligned} r &= \left[ \frac{-|W_b(\theta^*, \varphi)|^2 - W_b(\varphi, \varphi^*) W_b(\theta, \theta^*)}{W_b(\varphi, \varphi^*)^2} \right]^{1/2} = \left[ -\frac{|W_b(\theta, \varphi)|^2}{W_b(\varphi, \varphi^*)^2} \right]^{1/2} = \\ &= \left[ \operatorname{Im} \lambda \int_0^b |\varphi|^2 dx \right]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

Donc  $\tilde{F}(x, 0)^{-1} = \tilde{F}(0, x)$ , et plus généralement  $\tilde{F}(y, x)$  pour  $y < x$ , envoie  $\{\operatorname{Im} z > 0\}$  sur l'intérieur d'un disque inclus dans le demi-plan supérieur  $\{\operatorname{Im} \lambda > 0\}$  d'après la formule (II.22) (il est essentiel que  $\operatorname{Im} \lambda \neq 0$ , sinon  $\tilde{F} \in \operatorname{SL}(2, \mathbb{R})$  envoie  $\{\operatorname{Im} z > 0\}$  sur lui-même).

En appliquant alors la relation de transitivité :

$$\tilde{F}(0, b_2) = \tilde{F}(0, b_1) \tilde{F}(b_1, b_2)$$

dans la situation  $0 < b_1 < b_2$  (voir figure),



on voit que le disque obtenu en partant de  $b_2$  est inclus dans le disque obtenu en partant de  $b_1$ . Donc lorsque  $b \rightarrow +\infty$  ( $\lambda$  fixé), la frontière  $C_{b,\lambda}$  du disque converge, soit vers un vrai cercle  $C_{\infty,\lambda}$  (cas du cercle-limite), soit vers un point  $\ell_\lambda$  (cas du point-limite). La relation  $\tilde{F}(a_2, b) = \tilde{F}(a_2, a_1) \tilde{F}(a_1, b)$  rend cette distinction indépendante du choix de  $a$  (fixé).

Pour tout  $\ell \in C_{\infty,\lambda}$  (ou  $\ell = \ell_\lambda$  dans le cas du point-limite), par passage à la limite dans (II.22) on obtient :

$$\int_0^\infty |\theta + \ell\varphi|^2 dr \leq \frac{\text{Im } \ell}{\text{Im } \lambda} < \infty \quad (\text{II.25})$$

Dans le cas du cercle-limite on vérifie (II.25) avec deux valeurs  $\ell_1 \neq \ell_2$ , donc deux solutions indépendantes  $\psi_1$  et  $\psi_2$  de (II.6) ( $\Rightarrow$  toutes les solutions) sont  $L^2$  dans un voisinage de  $+\infty$  (abus de notation :  $\psi_1, \psi_2 \in L^2(+\infty)$ ). Dans le cas du point limite on a encore  $\theta + \ell_\lambda\varphi \in L^2(+\infty)$ , mais  $\varphi \notin L^2(+\infty)$  car le rayon dans (II.24) tend vers 0 : une seule solution (au facteur constant près) est  $L^2$  à  $+\infty$ .

Proposition : Si deux solutions (indépendantes) de  $\hat{H}\psi = \lambda_0\psi$  sont  $L^2(+\infty)$  pour un  $\lambda_0 \in \mathcal{C}$ , alors c'est vrai pour tout autre  $\lambda \in \mathcal{C}$ .

Preuve : Soient  $\theta$  et  $\varphi$  les deux solutions de  $\hat{H}\psi = \lambda_0\psi$  vérifiant les conditions aux limites (II.20). On cherche à exprimer les solutions de  $\hat{H}u = \lambda u$  par la méthode de variation des constantes :

$$u = c_1(x)\theta + c_2(x)\varphi, \text{ avec la condition auxiliaire } 0 = c_1'\theta + c_2'\varphi.$$

En intégrant le système du 1er ordre qui en résulte, on trouve la relation :

$$u(x) = (\lambda - \lambda_0) \left[ \theta(x) \int_c^x \varphi u \, d\xi - \varphi(x) \int_c^x \theta u \, d\xi \right] + C_1 \theta + C_2 \varphi$$

où  $c, C_1, C_2$  sont des constantes d'intégration. Définissant  $\|f\|_{[c,x]} = \left( \int_c^x |f|^2 d\xi \right)^{1/2}$

et appliquant l'inégalité de Schwarz, on trouve que :

$$\|u\|_{[c,x]} \leq 2|\lambda - \lambda_0| M^2 \|u\|_{[c,x]} + (|C_1| + |C_2|)M$$

avec  $M = \sup(\|\theta\|_{[c,x]}, \|\varphi\|_{[c,x]})$ . Avec notre hypothèse  $\varphi, \theta \in L^2(+\infty)$  on peut



choisir  $c$  tel que  $M \leq \frac{1}{2} |\lambda - \lambda_0|^{1/2}$ , alors :

$\|u\|_{[c,x]} \leq 2(|C_1| + |C_2|)M$  indépendamment de  $x$ , donc  $u \in L^2(+\infty)$  . CQFD .

Définition : L'opérateur  $\hat{H}$  est dit complet à  $+\infty$  si pour un  $\lambda \in \mathcal{C}$  (donc pour tout  $\lambda \in \mathcal{C}$ ) l'équation  $\hat{H}\psi = \lambda\psi$  admet au plus une solution (au facteur près) qui soit  $L^2$  à  $+\infty$ .

Autrement dit :  $\hat{H}$  est complet à  $+\infty \iff \exists \lambda \notin \mathbb{R}$  (donc  $\forall \lambda \notin \mathbb{R}$ ) l'équation  $\hat{H}\psi = \lambda\psi$  est à point limite à  $+\infty$ . (dans ce cas le nombre de solutions dans  $L^2(+\infty)$ , à savoir 0 ou 1, ne se met à dépendre de  $\lambda$  que pour  $\lambda \in \mathbb{R}$ ).

Toute la discussion qui précède se répète indépendamment pour la borne  $-\infty$ , en faisant  $a \rightarrow -\infty$  à  $b$  fixé.

Le critère de Weyl : Si  $V$  est une fonction continue réelle sur  $\mathbb{R}$ , l'opérateur  $\hat{H} = -d^2/dx^2 + V$ , défini sur le domaine  $C_0^\infty(\mathbb{R})$ , est essentiellement auto-adjoint  $\iff \hat{H}$  est complet à  $+\infty$  et à  $-\infty$ .

Preuve : Il faut d'abord préciser le domaine de l'adjoint  $D(\hat{H}^\dagger) \subset \mathcal{X}$ . Si  $\psi \in D(\hat{H}^\dagger)$ , nécessairement  $\hat{H}^\dagger\psi = -\psi'' + V\psi$  au sens des distributions, et  $\hat{H}^\dagger\psi \in L^2 \Rightarrow \psi'' (=V\psi - \hat{H}^\dagger\psi) \in L^2_{loc} \Rightarrow$  (par une application du lemme de Sobolev) :  $\psi'$  absolument continue  $\Rightarrow \psi$  de classe  $C^1$  ; réciproquement l'ensemble des quatre dernières conditions implique  $\psi \in D(\hat{H}^\dagger)$ .

L'opérateur  $\hat{H}$  est évidemment symétrique sur  $C_0^\infty(\mathbb{R})$  ; il reste à vérifier la condition b) ci-dessus, à savoir : que  $-\psi'' + V\psi = i\psi$  n'admet pas de solutions dans  $D(\hat{H}^\dagger) \setminus \{0\}$ . D'après ce qui précède, il s'agit de compter les solutions classiques ( $\in C^1$ ) et de carré intégrable. Or il existe toujours une solution  $\psi = \theta + \lambda\varphi \in L^2(+\infty)$  (pour  $\lambda = i$ , par exemple) : dans le cas du point limite :  $\lambda = l$  le point limite, sinon  $\lambda$  quelconque. Si  $\hat{H}$  est non complet en  $-\infty$  cette solution est aussi  $L^2$  en  $-\infty$ , donc  $\hat{H}$  ne peut être essentiellement auto-adjoint (de même si  $\hat{H}$  est non complet en  $+\infty$ ).

Si maintenant  $\hat{H}$  est complet en  $+\infty$  et  $-\infty$ , la seule façon d'avoir une solution  $\psi \in L^2(\mathbb{R})$  serait que les deux points limites (pour  $b \rightarrow +\infty$  et  $a \rightarrow -\infty$  respectivement) coïncident. Mais de même que le premier vérifie  $\text{Im } \lambda > 0$  (pour  $\lambda=i$ ), le second vérifie  $\text{Im } \lambda < 0$  . CQFD.

#### 4. Complétudes classique et quantique

L'intérêt de cette section est double :

- interpréter la propriété de complétude de l'opérateur  $\hat{H}$  (juste définie) en termes du mouvement classique si le potentiel  $V$  est un peu régulier ;
- fournir des conditions suffisantes, non nécessaires mais ayant l'avantage d'être explicitement vérifiables, pour satisfaire au critère de Weyl.

Complétude classique : (dans ce § on suppose  $V$  réelle de classe  $C^1$ , et  $V'$  uniformément lipschitzienne sur tout compact afin d'assurer la solvabilité locale des équations). Rappelons que le mouvement classique dans l'espace de phase  $\mathbb{R}^2$  est défini par les équations de Hamilton :

$$\dot{x}(=dx/dt) = \partial H / \partial p \qquad \dot{p} = - \partial H / \partial x \qquad (II.26)$$

où  $H = p^2 + V(x)$ , cette fonction étant constante le long des trajectoires. Ces équations définissent un flot dans  $\mathbb{R}^2$  qui est dit complet s'il est défini pour toutes les valeurs du paramètre  $t$ . Si ce n'est pas le cas, soit  $\{x(t), p(t)\}$  une trajectoire impossible à prolonger au-delà d'un instant  $t = \tau < \infty$ . Cette trajectoire quitte tout compact  $K \subset \mathbb{R}^2$  avant cet instant, sinon elle se prolongerait jusqu'à  $\tau + \varepsilon_K$  ( $\varepsilon_K$  étant l'intervalle minimum d'existence d'une solution avec données de Cauchy dans  $K$  ;  $\varepsilon_K > 0$  est garanti par le théorème d'existence locale). Par conservation de l'énergie la trajectoire projetée  $\{x(t)\}$  doit quitter tout compact de  $\mathbb{R}$  avant l'instant  $\tau$ , donc  $\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = \pm \infty$ .

On dit que le mouvement classique est complet à  $x = + \infty$  si aucune trajectoire  $\{x(t)\}$  n'atteint  $+ \infty$  en un temps (positif ou négatif) fini. Une définition similaire s'applique indépendamment en  $x = - \infty$ .

Théorème : Le mouvement classique est complet en  $+ \infty$

$$\Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} V \text{ non borné supérieurement pour } x \rightarrow + \infty \\ \text{ou bien } \int^{\infty} (E-V)^{-1/2} dx = \infty \text{ pour tout } E > 0 \text{ assez grand} \end{array} \right\} \qquad (II.27)$$

Preuve : Si  $V$  n'est pas borné supérieurement, aucune trajectoire ne peut aller à l'infini par conservation de l'énergie ( $p^2 + V(x) = E$  fixé). Dans le cas contraire, la trajectoire  $x(t)$  étant solution de l'équation différentielle  $\frac{dx}{dt} = 2p = 2\sqrt{E-V(x)}$ , on a complétude ou non suivant que l'intégrale pour  $t = \pm \int (E-V(x))^{-1/2} dx$  diverge ou converge pour  $x \rightarrow +\infty$  (il faut prendre  $E > \limsup_{x \rightarrow +\infty} V(x)$  car les zéros de  $(E-V)$  à distance finie font rebrousser la trajectoire).

Complétude quantique : Une condition de la forme (II.27) va aussi impliquer que l'opérateur  $H$  (responsable de l'évolution en mécanique quantique) est complet en  $+\infty$  au sens défini auparavant.

Théorème : Si  $V$  est continue réelle et s'il existe une fonction minorante  
 $-M(x) \leq V(x)$  avec  $M$  de classe  $C^1$ ,  $M > 0$ , et :

1)  $M' M^{-3/2}$  borné pour  $x \rightarrow +\infty$  (variante : 1)' :  $M$  non décroissante)

2)  $\int_{c_1}^{+\infty} M^{-1/2} dx$  diverge ,

alors  $\hat{H}$  est complet en  $+\infty$ .

Preuve : On montre que si  $\hat{H}$  est non complet, 1) contredit 2) (pour la variante 1)' voir le livre de Titchmarsh, chapitre II, théorème 2.20).

Lemme : Si  $u$  est solution réelle de  $u'' = Vu$ , alors  $u \in L^2(\infty) \Rightarrow u' M^{-1/2} \in L^2(\infty)$  .

Preuve du lemme : Soient  $c_1 < c < \infty$  fixés,  $K_1 = \int_{c_1}^{\infty} u^2 dx$ . Alors :

$$K_1 \geq \int_{c_1}^c u^2 dx > \int_{c_1}^c -\frac{Vu^2}{M} dx = - \int_{c_1}^c \frac{u''u}{M} dx ,$$

intégrant par parties :

$$\left[ -\frac{u'u}{M} \right]_{c_1}^c + \int_{c_1}^c \frac{u'^2}{M} dx - K_1 \leq \int_{c_1}^c \frac{uu'M'}{M^2} dx \leq K_2 \left[ \int_{c_1}^c \frac{u'^2}{M} dx \int_{c_1}^c u^2 dx \right]^{1/2}$$

(on a écrit une inégalité de Schwarz exploitant la condition 1) ).

Alors  $\left[ \frac{uu'}{M} \right]_{c_1}^c \geq -K_1 + \int_{c_1}^c \frac{u'^2}{M} - K_2 \left[ \int_{c_1}^c \frac{u'^2}{M} \int_{c_1}^c u^2 \right]^{1/2} \rightarrow +\infty$  si  $u'M^{-1/2} \notin L^2(+\infty)$ ,

auquel cas  $(u^2)' > 0$  dans un voisinage de  $+\infty$ , donc  $u^2$  est croissant ; ceci est interdit par  $u \in L^2(+\infty)$  et achève la preuve du lemme.

Preuve du théorème : Si  $\hat{H}$  est non complet, soient  $\theta$  et  $\varphi$  deux solutions indépendantes de  $u'' = Vu$  vérifiant  $W(\theta, \varphi) \equiv 1$  ; toutes deux sont dans  $L^2(+\infty)$ . Alors  $M^{-1/2} = W(\theta, \varphi)M^{-1/2} = \theta(\varphi'M^{-1/2}) - \varphi(\theta'M^{-1/2})$  est intégrable à  $+\infty$  d'après le lemme, ce qui contredit 2).

Corollaire : Si  $V$  est réelle de classe  $C^1$  et vérifie la condition (II.27) ainsi que la condition de régularité :

$$V' |V|^{-3/2} \text{ bornée à l'infini} \tag{II.28}$$

alors  $\hat{H}$  est complet en  $+\infty$ .

(Preuve : prendre pour  $M$  une approximation  $C^1$  de  $-|V|$ ).

Exemple : il suffit pour que  $\hat{H}$  soit complet qu'il existe  $c > 0$  tel que  $V(x) \geq -cx^2$  pour  $x \rightarrow +\infty$  (inversement, les potentiels  $V(x) = -cx^{2+\epsilon}$  ( $c, \epsilon > 0$ ) ne sont pas complets pour  $x \rightarrow +\infty$  : voir Titchmarsh). Noter qu'aucune majoration du potentiel n'intervient pour assurer la complétude.

Références pour ce chapitre : livres de Titchmarsh (chap. I-IV), Coddington-Levinson (chap. 9), Reed-Simon (tome I, chap. VIII ; tome II, chap. X et en particulier Appendice X.1).

### III - THEORIE DE STURM-LIOUVILLE : ETUDE DU SPECTRE

Dans ce chapitre  $V$  est continue réelle,  $\lambda$  réel (et  $Q = V - \lambda$ ). Il suffit alors d'étudier les solutions réelles de  $\psi'' = Q\psi$ . Les zéros de  $\psi$  sur l'axe réel vont jouer un rôle crucial ; ces zéros sont simples :  $\psi(x_0) = \psi'(x_0) = 0 \Rightarrow \psi \equiv 0$  par unicité de la solution du problème de Cauchy en  $x_0$ .

#### 1. Théorème de comparaison de Sturm

Enoncé : Si  $\psi_1'' = Q_1\psi_1$  et  $\psi_2'' = Q_2\psi_2$  avec  $Q_2 < Q_1$ , alors entre deux zéros consécutifs  $a' < b'$  de  $\psi_1$  il y a au moins un zéro de  $\psi_2$ .

En effet la relation (II.15) s'écrit ici :

$$\int_{a'}^{b'} (Q_2 - Q_1)\psi_1\psi_2 \, dx = W(\psi_1, \psi_2) \Big|_{a'}^{b'} = (-\psi_1'\psi_2) \Big|_{a'}^{b'} \quad (\text{III.1})$$

et si ni  $\psi_1$  ni  $\psi_2$  ne s'annulent dans  $]a', b'[,$  on obtient une contradiction de signes entre les deux membres (on peut supposer  $\psi_1, \psi_2 > 0$  : voir figure).



Le théorème demeure vrai si l'on remplace  $a'$  par un point  $a$  où  $\psi_1$  et  $\psi_2$  vérifient la même condition aux limites :  $\frac{\psi_1'}{\psi_1}(a) = \frac{\psi_2'}{\psi_2}(a) (\Leftrightarrow W_a(\psi_1, \psi_2) = 0)$  ;  $b'$  demeurant le zéro de  $\psi_1$  immédiatement supérieur.

Application : le problème aux limites dans un intervalle fini  $]a, b[$  : nous venons de voir que  $\psi_2$  admet au moins un zéro dans  $]a, b'[,$  donc le premier zéro de  $\psi_2$  à partir de  $a$  est inférieur au premier zéro  $b'$  de  $\psi_1$ . Si  $b''$  est le second zéro de  $\psi_1$ , le théorème de Sturm fournit au moins un zéro de  $\psi_2$  dans  $]b', b''[,$  etc ... donc de proche en proche nous voyons que le  $k^e$  zéro de  $\psi_2$  est inférieur au  $k^e$  zéro de  $\psi_1$ .

Posant  $Q = V - \lambda$  ce résultat s'interprète comme suit : les zéros de la solution

$\psi$  assujettie à la condition aux limites :  $\frac{\psi'}{\psi}(a) = \alpha \in \mathbb{R}$  fixé, se déplacent vers la gauche lorsque  $\lambda$  croît. Donc le nombre  $n(\lambda)$  de zéros de  $\psi$  dans  $]a, b[$  croît avec  $\lambda$  (en effet les zéros ne peuvent ni traverser le point  $a$ , ni se croiser car ils restent simples). En encadrant  $V$  entre deux potentiels constants (explicitement solubles) et en utilisant à nouveau Sturm, on voit que  $n(\lambda) = 0$  pour  $\lambda < \inf_{]a, b[} V$  et que  $n(\lambda) \rightarrow +\infty$  pour

$\lambda \rightarrow +\infty$ . Soit  $\lambda_k^\infty$  la valeur de  $\lambda$  pour laquelle  $n(\lambda)$  saute de  $k$  à  $(k+1)$  :  $\{\lambda_k^\infty\}_{k \in \mathbb{N}}$  est une suite croissante vers  $+\infty$ . Dans tout intervalle  $]\lambda_{k-1}^\infty, \lambda_k^\infty[$  on montre que la fonction  $\lambda \rightarrow \frac{\psi'}{\psi}(b) = \beta(\lambda)$  est monotone décroissante de  $+\infty$  à  $-\infty$ . Donc les solutions  $\{\lambda_k^\beta\}$  de  $\beta(\lambda) = \beta$  forment aussi une suite infinie croissante vers  $+\infty$  : c'est le spectre de valeurs propres du problème aux limites :

$$\psi'' = (V-\lambda)\psi, \quad \frac{\psi'}{\psi}(a) = \alpha, \quad \frac{\psi'}{\psi}(b) = \beta.$$

A la valeur propre  $\lambda_k$  correspond une (et une seule) fonction propre  $\lambda_k$ , qui a exactement  $k$  zéros (pour les détails : Titchmarsh, chap. V).

Nous verrons que le même type de spectre s'obtient dans l'intervalle  $]-\infty, +\infty[$  à condition que  $V(x) \rightarrow +\infty$  pour  $x \rightarrow \pm\infty$ .

## 2. Théorème de Sturm quand $a = -\infty$

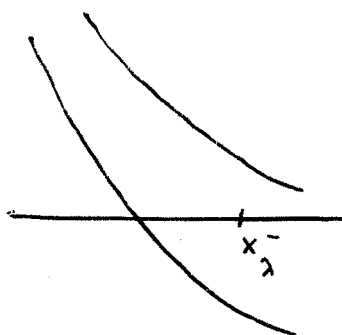
Nous nous restreignons d'emblée à :

$$\lambda \in \Lambda_- = ]-\infty, \liminf_{x \rightarrow -\infty} V(x)[ \quad (\text{supposé non vide}) \quad (\text{III.2})$$

Notons  $x_\lambda^-$  le plus petit zéro de  $Q(x) = V(x-\lambda)$ , et  $c = \frac{1}{2} \liminf_{x \rightarrow -\infty} Q(x) > 0$ .

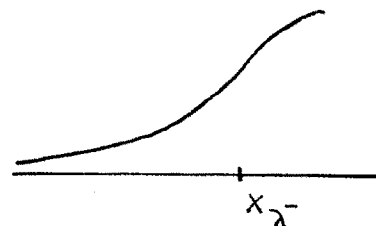
Il n'y a alors que deux possibilités pour le comportement d'une solution  $\psi(x)$  lorsque  $x \rightarrow -\infty$  :

1) ou bien il existe  $x_1 < x_\lambda^-$  tel que  $\psi$  et  $\psi'$  soient de signes contraires en  $x_1$ , par ex.  $\psi > 0, \psi' < 0$  ; alors  $\psi'' = Q\psi > 0$ , donc  $\psi'$  décroît et  $\psi \rightarrow +\infty$  lorsque  $x \rightarrow -\infty$  ;  $\psi$  et  $\psi'$  demeurant alors de signes contraires  $\forall x \leq x_1$ , un tel  $\psi$  admet au plus un zéro dans l'intervalle  $]-\infty, x_\lambda^-[$ .



cas 1)

cas 2)



2) ou bien  $\psi$  et  $\psi'$  sont de même signe (par ex.  $> 0$ )  $\forall x < x_\lambda^-$  ; alors  $\psi'' = Q\psi > 0 \Rightarrow \psi$  et  $\psi'$  décroissent quand  $x \rightarrow -\infty$ , donc ont des limites nécessairement nulles (évident pour  $\psi'$  ; par ailleurs  $\psi'' \in L^1(-\infty)$  implique :

$$\psi = \psi'' / Q < \psi'' / c \in L^1(-\infty) \Rightarrow \psi(-\infty) = 0 ; \text{ de plus } \psi \in L^1(-\infty) \text{ et } \psi(-\infty) = 0$$

impliquent  $\psi \in L^2(-\infty)$  ; enfin un tel  $\psi$  n'a aucun zéro dans  $] -\infty, x_\lambda[$ .

Conséquence : Le théorème de Sturm s'étend au cas  $a = -\infty$  pour des solutions  $\psi_1$  et  $\psi_2$  toutes deux dans  $L^2(-\infty)$ , grâce au bon comportement de  $\psi$  et  $\psi'$  pour  $x \rightarrow -\infty$  dans le cas 2).

Tout ce qui précède s'applique mutatis mutandis au cas  $b = +\infty$ ,  $x \rightarrow +\infty$ , à condition que :

$$\lambda \in \Lambda_+ = ]-\infty, \liminf_{x \rightarrow +\infty} V(x)[ \text{ (supposé non vide) } . \quad (\text{III.3})$$

La région asymptotique est  $x > x_\lambda^+$  (le plus grand zéro de  $Q$ ). Le type 1) correspond à  $\psi$  et  $\psi'$  de même signe  $\forall x > x_1$ , avec  $x_1 = x_\lambda$  ou bien  $x_1 =$  zéro (unique) de  $\psi$  dans  $]x_\lambda, +\infty[$  ; le type 2) ( $=L^2(+\infty)$ ) correspond à  $\psi$  et  $\psi'$  de signes contraires  $\forall x > x_\lambda$ .

Remarque : il existe toujours une solution  $\psi_- \in L^2(-\infty)$  dans le cas (III.2) (pas deux puisque  $H$  est complet). Partant d'une solution  $\psi$  de type 1), on sait fabriquer une autre solution indépendante :

$$\varphi(x) = \psi(x) \int_{-\infty}^x \frac{dy}{\psi(y)^2} \quad (\text{III.4})$$

$$\text{et } 0 < \varphi(x) < \int_{-\infty}^x \frac{dy}{\psi(y)^2} \quad (x \rightarrow -\infty) \Rightarrow \varphi \in L^2(-\infty) .$$

3. Le spectre de  $\hat{H}$  dans  $]-\infty, +\infty[$

Nous regardons les zéros réels de la solution  $\psi_{-, \lambda} \in L^2(-\infty)$  quand  $\lambda$  varie dans  $\Lambda_- \cap \Lambda_+ = ]-\infty, \liminf_{|x| \rightarrow \infty} V(x)[$ . Comme dans le cas  $]a, b[$  fini, on déduit du théo-

rème de Sturm que ces zéros se déplacent vers la gauche quand  $\lambda$  croît, et que leur nombre  $n(\lambda)$  est une fonction croissante puisqu'ils ne peuvent pas traverser le point  $x_\lambda^-$ .

Proposition : i)  $n(\lambda) = 0$  si  $\lambda < \inf_{\mathbb{R}} V = V_{\min}$ .

ii)  $\lambda' \in \Lambda_- \cap \Lambda_+$  est un point de saut de  $n(\lambda) \iff \lambda'$  est valeur propre de  $\hat{H}$  ;  $\psi_{-, \lambda'} \in \mathcal{X}$  est la seule fonction propre associée, et elle a  $k = n(\lambda'^-)$  zéros réels, tous dans l'intervalle  $]x_{\lambda'}^-, x_{\lambda'}^+[$  ; enfin  $\Delta n = n(\lambda'^+) - n(\lambda'^-) = 1$ .

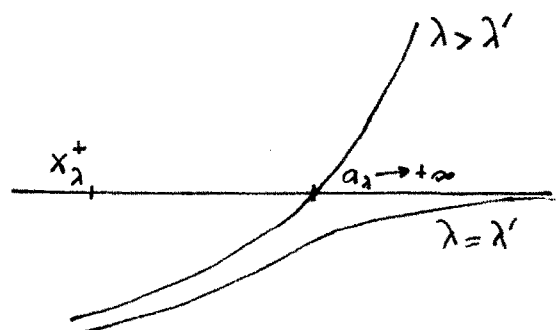
iii) si de plus  $V(x) \rightarrow +\infty$  pour  $x \rightarrow \pm\infty$ , alors la suite ordonnée des valeurs propres  $\{\lambda_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  croît vers  $+\infty$ , et  $\hat{H}$  n'a pas de spectre continu (en termes actuels : la résolvante  $(\hat{H}-z)^{-1}$  est un opérateur compact).

Preuve : i) ( $V_{\min} > -\infty$  d'après (III.2-3)). On applique le théorème de Sturm avec  $Q_1 = V - \lambda$  et  $Q_2 = \frac{V_{\min} - \lambda}{2}$  :  $\psi_1 = \psi_- \in L^2(-\infty)$  n'a pas plus de zéros que la solution  $\psi_2 \in L^2(-\infty)$ , laquelle vaut  $\psi_2 = \exp \left[ \left( \frac{V_{\min} - \lambda}{2} \right)^{1/2} x \right]$  et n'a aucun zéro.

ii) si  $\lambda'$  est un point de saut où  $\Delta n$  zéros apparaissent, ceux-ci doivent tendre vers  $+\infty$  quand  $\lambda \rightarrow \lambda'^+$  : donc ils deviennent tous supérieurs à  $x_{\lambda''}^+$  pour un certain  $\lambda'' > \lambda'$ , mais l'étude des solutions pour  $x \rightarrow +\infty$  montre qu'au plus un zéro peut exister dans  $]x_{\lambda''}^+, +\infty[$  : donc  $\Delta n = 1$  (d'où l'on tire que  $\psi_{-, \lambda}$  a toujours  $n(\lambda^-)$  zéros, et que  $n(\lambda)$  compte le nombre de points de saut inférieurs à  $\lambda$ ). Pour tout  $\lambda \in ]\lambda', \lambda''[$  la solution  $\psi_{-, \lambda}$  est du type 1) pour  $x \rightarrow +\infty$  avec un zéro  $a_\lambda > x_\lambda$ , donc :

$$\begin{aligned} \psi_{-, \lambda}(x) \psi'_{-, \lambda}(x) &> 0 && \text{pour } x > a_\lambda \\ &< 0 && x_\lambda^+ < x < a_\lambda \end{aligned}$$

A la limite  $\lambda \rightarrow \lambda'^+$ ,  $a_\lambda \rightarrow +\infty$  donc





$\psi_{-, \lambda'}(x) \psi_{-, \lambda}(x) < 0 \forall x > x_{\lambda}^+$ , ce qui correspond au type 2 pour  $x \rightarrow +\infty$  :  
 $\psi_{-, \lambda'} \in L^2(+\infty)$  ; mais par hypothèse  $\psi_{-, \lambda'} \in L^2(-\infty)$  donc  $\psi_{-, \lambda'} \in L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{R}$ , et  $\lambda'$  est valeur propre (de multiplicité 1 car il n'y a qu'une solution dans  $L^2(-\infty)$ ,  $\hat{H}$  étant complet).

Inversement, si  $\lambda'$  est valeur propre et si  $k$  est le nombre de zéros de la fonction propre  $\psi_{-, \lambda'} \in \mathcal{R}$ , alors  $n(\lambda'^- ) = k$  par continuité ; nous allons montrer que  $k < n(\lambda'^+ ) (=k+1$  car  $\Delta n=1$ ) : en fait  $\psi_{-, \lambda}$  acquiert pour  $\lambda > \lambda'$  un zéro  $a_{\lambda}$  à droite du plus grand zéro  $b_{\lambda'}$  de  $\psi_{-, \lambda'}$  : ce zéro vient en supplément des zéros provenant du déplacement vers la gauche des zéros de  $\psi_{-, \lambda'}$ . Si  $\psi_{-, \lambda} \in L^2(+\infty)$  l'existence de  $a_{\lambda}$  découle du théorème de Sturm quand  $b = +\infty$  ; si  $\psi_{-, \lambda}$  est du type 1) et n'a pas de zéro  $> b_{\lambda'}$ , on écrit la relation (III.1) entre  $b_{\lambda'}$  et  $X > x_{\lambda}^+$  pour  $\psi_1 = \psi_{-, \lambda'}$  et  $\psi_2 = \psi_{-, \lambda} =$

$$(\lambda' - \lambda) \int_{b_{\lambda'}}^X \psi_1 \psi_2 dx = W(\psi_1, \psi_2) \Big|_{b_{\lambda'}}^X = \psi_1(X) \psi_2'(X) - \psi_1'(X) \psi_2(X) + \psi_1'(b_{\lambda'}) \psi_2(b_{\lambda'}) .$$

Avec les choix de signes  $\psi_1 > 0$ ,  $\psi_1' < 0$  (type 2) et  $\psi_2(X) > 0$ ,  $\psi_2'(X) > 0$  pour  $X$  grand (type 1), on obtient une contradiction de signes si  $\psi_2$  ne s'annule pas dans  $]b_{\lambda'}, X[$ . CQFD.

iii) Si  $V(x) \rightarrow +\infty$  pour  $x \rightarrow \pm\infty$ , alors  $\Lambda_+ = \Lambda_- = \mathbb{R}$ . Si un intervalle fini quelconque  $[a, b]$  on pose  $Q_2 = V - \lambda$ ,  $Q_1 = C - \lambda$  avec  $C > \sup_{[a, b]} V$ . Par le théorème de

Sturm, le nombre de zéros  $n(\lambda)$  de  $\psi_{-, \lambda}$  est minoré par le nombre de zéros dans  $[a, b]$  d'une solution de  $\psi_2'' = Q_1 \psi_2$ , lequel nombre est de l'ordre de  $(b-a) (\lambda - C)^{1/2} \pi$  et tend vers  $\infty$  quand  $\lambda \rightarrow +\infty$ . Par ailleurs les points de saut  $\{\lambda_k\}$  ne peuvent s'accumuler en  $\lambda' < \infty$  (sinon une infinité de zéros pénétreraient dans le compact  $[x_{\lambda'}^-, x_{\lambda'}^+]$ ) : ils forment donc une suite croissante vers  $+\infty$ , qui constitue le spectre de valeurs propres de  $\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V$  ; ces valeurs propres sont simples.

Pour prouver l'absence de spectre continu, nous établissons l'alternative de Fredholm : pour  $\lambda \in \mathbb{C}$ , si  $(\hat{H} - \lambda \mathbb{1})$  est injectif, il est aussi surjectif. C'est immédiat à une dimension parce qu'on possède une expression explicite de la résol-

vante  $(\hat{H}-\lambda\mathbf{1})^{-1}$  comme opérateur intégral :

$$[(\hat{H}-\lambda\mathbf{1})^{-1}\varphi](x) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\lambda, x, x')\varphi(x')dx'$$

$$\text{avec } R(\lambda, x, x') = W(\psi_-, \psi_+)^{-1} \psi_-(x_>)\psi_+(x_<) \quad (\text{III.5})$$

et  $x_> = \max(x, x')$ ,  $x_< = \min(x, x')$  ;  $\psi_+$  ( $\psi_-$ ) sont les solutions de  $\psi'' = (V-\lambda)\psi$  respectivement dans  $L^2(-\infty)$  ( $L^2(+\infty)$ ), elles sont indépendantes ( $W(\psi_+, \psi_-) \neq 0$ ) ssi  $\lambda$  n'est pas valeur propre, et alors (III.5) définit un opérateur borné ; on vérifie que c'est la résolvante par calcul direct.

Remarques :

- Il résulte de (ii) que si  $\{\lambda_k\}$  est la suite des valeurs propres rangée par ordre croissant, l'indice  $k$  compte le nombre de zéros (réels) de la fonction propre correspondante  $\psi_k$  (cet indice est appelé nombre quantique). En particulier le fondamental (état de plus basse énergie) n'a jamais de zéro. A plusieurs dimensions, le rangement des valeurs propres par ordre croissant n'a plus aucune signification.

- la restriction à  $\Lambda_+ \cap \Lambda_-$  est importante. En général,  $\mathbb{R} \setminus (\Lambda_+ \cap \Lambda_-)$  constitue le spectre continu et les solutions correspondantes de l'équation de Schrödinger décrivent des états de diffusion (scattering). Les potentiels vérifiant (iii) empêchent la diffusion et sont appelés confinants.

- Cas particulier : soit  $\hat{P}$  l'opérateur de parité :

$$(\hat{P}\psi)(x) = \psi(-x) \quad \psi \in \mathcal{X} \quad (\text{III.6})$$

$$\text{Alors } [\hat{H}, \hat{P}] = 0 \iff V(x) = V(-x) \quad (\text{III.7})$$

Dans ce cas toute fonction propre  $\psi_k$  est soit paire, soit impaire (sinon la valeur propre serait dégénérée) ; en fait  $\psi_0$  (l'état fondamental),  $\psi_2, \psi_4 \dots$  sont pairs et les  $\psi_{2k+1}$  impairs puisqu'une fonction paire (impaire) a un nombre pair (impair) de zéros.

#### 4. Exemple fondamental : l'oscillateur harmonique

Il s'agit de l'opérateur de Schrödinger :

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \quad (\text{III.8})$$

Il est bien connu que le problème aux valeurs propres  $\hat{H}\psi = \lambda\psi$  est explicitement soluble et admet le spectre :  $\lambda_k = 2k+1$  (les fonctions propres sont les fonctions d'Hermite) ; pour le traitement classique voir par exemple : Titchmarsh chapitre IV, Schiff chapitre 4.

Nous préférons montrer que (III.8) se résout par une autre méthode, qui a l'avantage d'expliquer ce résultat en mettant l'équation

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right)\psi = \lambda\psi \quad (\text{III.9})$$

sous une forme du premier ordre, donc soluble par quadratures (voir Introduction). Le membre de gauche étant presque factorisable.

$$-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 = \left(x - \frac{d}{dx}\right) \left(x + \frac{d}{dx}\right) + 1 \quad (\text{III.10})$$

nous posons :

$$a = x + \frac{d}{dx} \quad a^+ = x - \frac{d}{dx}$$

(opérateurs formellement adjoints l'un de l'autre ; en mécanique quantique ils sont appelés opérateur d'annihilation ( $a$ ) et de création ( $a^+$ )).

- Spectre de l'opérateur  $a$  : pour tout  $z \in \mathbb{C}$  l'équation aux valeurs propres  $au = zu$  a sa solution  $u_z \in \mathcal{X} = L^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R})$  :

$$u_z(x) = C_z e^{zx - x^2/2} \quad (C_z \text{ arbitraire}) \quad (\text{III.11})$$

Il est commode de choisir  $C_z = \pi^{-1/4} e^{-z^2/4}$  ; on trouve alors, utilisant (A.4), que  $\|u_z\| = e^{|z|^2/4}$

- Représentation de Bargmann : pour tout  $\psi \in \mathcal{H}$  on pose :

$$\psi_B(z) = \langle u_{z^*} | \psi \rangle = \pi^{-1/4} e^{-z^2/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{zx-x^2/2} \psi(x) dx \quad (\text{III.12})$$

( $\langle | \rangle$  dénote le produit scalaire hilbertien dans  $\mathcal{H}$ ). L'intégrale converge très bien pour tout  $z$  et définit une fonction entière de  $z$ , telle que  $|\psi(z)| \leq \|\psi\| e^{|z|^2/4}$  (inégalité de Schwarz). L'application  $\psi \rightarrow \psi_B$  est linéaire, et injective car composée d'applications injectives. La représentation de  $\mathcal{H}$  ainsi obtenue est très élégante et utile (cf. article de Bargmann).

L'action des opérateurs  $a$  et  $a^\dagger$  peut se lire dans cette représentation :

$$(a^\dagger \psi)_B(z) = \langle u_{z^*} | a^\dagger \psi \rangle = \langle a u_{z^*} | \psi \rangle = \langle z^* u_{z^*} | \psi \rangle = z \psi_B(z) \quad (\text{III.13})$$

$$(a \psi)_B(z) = \langle u_{z^*} | a \psi \rangle = \langle a^\dagger u_{z^*} | \psi \rangle = 2 \frac{d}{dz} \psi_B(z)$$

(en utilisant  $a^\dagger u_{z^*}(x) = 2x u_{z^*}(x) - a u_{z^*}(x) = (2x - z^*) u_{z^*}(x) = 2 \frac{d}{dz^*} u_{z^*}(x)$ ).

L'équation de Schrödinger (III.9) est devenue du 1er ordre :

$$((a^\dagger a + 1)\psi)_B = (2z \frac{d}{dz} + 1) \psi_B(z) = \lambda \psi_B(z) \quad (\text{III.14})$$

$$\Rightarrow \psi_B(z) = c z^\nu \quad \nu = \frac{\lambda-1}{2}, \quad c \text{ arbitraire.}$$

Cette solution existe pour tout  $\nu$  mais pour être acceptable comme transformée de Bargmann elle doit être une fonction entière, donc  $\nu = k \in \mathbb{N}$  ; réciproquement les polynômes en  $z$  sont bien les transformées des fonctions de la forme  $\psi(x) = e^{-x^2/2} P(x)$ , ( $P$  polynôme). D'où le spectre cherché :

$$\lambda_k = 2k+1, \quad k \in \mathbb{N}.$$

### 5. En guise de transition

Les chapitres suivants vont développer des méthodes asymptotiques d'approximation permettant, dans les cas de potentiels non harmoniques pour lesquels on ne

sait pas résoudre exactement l'équation de Schrödinger, d'obtenir néanmoins une connaissance du spectre beaucoup plus fine que celle donnée par le §.3. Ces résultats fins seront surtout illustrés en détail sur l'exemple  $V(x) = x^4$  (oscillateur quartique).

Références pour ce chapitre : livres de Titchmarsh (chapitre V), Coddington-Levinson (chapitre 8).

#### IV - LA METHODE BKW

##### 1. Introduction heuristique

Revenant au chapitre I, pour essayer de comprendre l'erreur commise en posant  $\varphi = C e^{\pm \int \sqrt{Q} dx}$  pour résoudre  $\varphi'' = Q\varphi$ , il est naturel de prendre  $\varphi'/\varphi = v$  comme nouvelle inconnue ; alors :

$$\varphi'' = Q\varphi \Leftrightarrow v^2 = Q - v' \quad (\text{équation de Riccati}) \quad (\text{IV.1})$$

$v = \pm Q^{1/2}$  est une bonne approximation si  $\left| \frac{v'}{v^2} \right| \sim \left| (Q^{-1/2})' \right|$  est petit devant 1 :  $Q$  doit être grand ou bien lentement variable. La correction suivante à (IV.1) donne  $v = \pm Q^{1/2} - Q'/4Q$ , à savoir deux solutions :

$$\varphi_{\pm} = |Q|^{-1/4} \exp \pm \int Q^{1/2} dx \quad (\text{IV.2})$$

constituant l'approximation de Liouville-Green (pour l'historique : voir Dingle, chapitre 13). Pour l'équation de Schrödinger :

$$-\hbar^2 \psi'' + (V-\lambda)\psi = 0 \quad , \quad Q = (V-\lambda) / \hbar^2 \quad (\text{IV.3})$$

le domaine de validité est non seulement  $(V-\lambda)$  grand ou lentement variable, mais aussi  $\hbar$  petit dans toutes les régions en  $x$  où  $V$  est dérivable et  $\neq \lambda$  (dans toute la suite le potentiel sera supposé réel et surtout dérivable autant que nécessaire). On s'attend donc à obtenir par cette méthode des solutions développées en séries formelles du paramètre  $\hbar$  autour de  $\hbar = 0$  (limite classique de la mécanique quantique, d'où le qualificatif de méthode semi-classique). On s'attend aussi à ce que ces développements présentent des pathologies car dans l'équation originelle (IV.3),  $\hbar$  est en facteur du terme le plus singulier (dérivatif) ; c'est aussi pourquoi ce qui précède n'est pas superflu pour suggérer la forme du résultat. Le paramètre  $\hbar$  étant très commode pour mesurer le degré de l'approximation, nous le conserverons explicitement en nous plaçant dans le cadre quantique, où la méthode s'appelle BKW (Brillouin-Kramers-Wentzel) ; elle est d'ailleurs très utile dans ce cadre, car  $\hbar$  est très petit en unités macroscopiques :  $\hbar \approx 10^{-27}$  erg  $\times$  sec.

Nous montrons maintenant que l'approximation (IV.2) peut être poussée à un ordre quelconque en puissances de  $\hbar$ .

- Dans la région classiquement permise :  $\{x | V(x) < \lambda\}$  (région de l'espace où le mouvement classique est possible), il y a une impulsion classique liée à la position par la conservation de l'énergie :

$$p^2 + V(x) = \lambda \quad \text{où} \quad p = 2 \, dx/dt \quad (\text{IV.4})$$

(en unités où la masse  $m = 2$ ). On pose donc

$$p(x) = (\lambda - V(x))^{1/2} \quad (\text{IV.5})$$

Comme  $Q < 0$ , l'équation (IV.2) suggère l'existence de solutions complexes  $\psi$  ayant une phase rapidement variable (avec un dénominateur  $\hbar$ ) et une amplitude lentement variable. On prend alors comme inconnues deux fonctions réelles  $a$  et  $S$  liées à  $\psi$  par :  $\psi = a e^{iS/\hbar}$ . Reportant dans (IV.3) et séparant les parties réelle et imaginaires du coefficient de  $e^{iS/\hbar}$ , on obtient un système équivalent à (IV.3), après avoir posé  $u = S'$  :

$$\begin{cases} u^2 - p^2 = \hbar^2 a''/a & (\text{IV.6}) \\ (a^2 u)' = 0 & (\text{IV.7}) \end{cases}$$

(IV.7) permet d'éliminer  $a = C u^{-1/2}$ . Il reste finalement :

$$u^2 - p^2 = \hbar^2 u^{1/2} (u^{-1/2})'' \quad (\text{IV.8})$$

pour 
$$\psi = u^{-1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \int u \, dx \quad (\text{IV.9})$$

Cette dernière formule décrit en fait deux solutions particulières de (IV.3) puisque les solutions de (IV.8) vont par paires ( $u$  et  $-u$ ). La solution générale de (IV.3) est donc :

$$\psi = b_+ u^{-1/2} e^{i\hbar^{-1} \int u \, dx} + b_- u^{-1/2} e^{-i\hbar^{-1} \int u \, dx} \quad (b_+, b_- \text{ arbitraires}) \quad (\text{IV.10})$$

L'étape d'approximation cruciale consiste à résoudre formellement (IV.8) en puissances de  $\hbar^2$  par substitution de :

$$u(x, \hbar) = \sum_0^{\infty} u_{2n}(x) \hbar^{2n}, \quad u_0(x) = p(x) \quad (\text{IV.11})$$

Avec cette valeur d'amorçage pour  $u_0$ , les  $u_{2n}(x)$  se déterminent explicitement ordre par ordre ; ce sont des polynômes en les dérivées  $V^{(j)}(x)$  ( $j \leq 2n$ ) et en  $p(x)^{-1}$ , impairs en  $p^{-1}(x)$ . Par exemple :

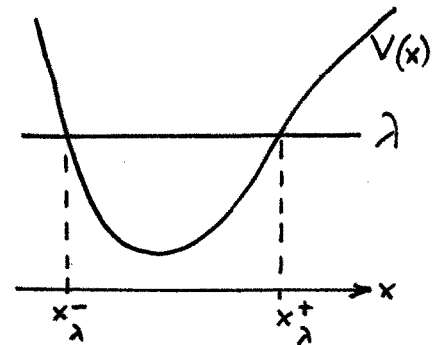
$$u_2 = \frac{V''}{8p^3} + \frac{5V'^2}{32p^5} = -\frac{1}{2} \frac{p''}{p^2} + \frac{3}{4} \frac{p'^2}{p^3} \quad (\text{IV.12})$$

- dans la région classiquement interdite  $\{x | V(x) > \lambda\}$  il n'y a plus de trajectoires classiques réelles, mais les équations (IV.6-12), qui résolvent de manière purement algébrique l'équation (IV.3) à un ordre fini quelconque en  $\hbar$  pour  $V < \lambda$ , continuent de remplir cette fonction pour  $V > \lambda$  à condition de prendre pour  $p(x)$  une des deux déterminations imaginaires pures de  $(\lambda - V(x))^{1/2}$ , au choix (on peut aussi se ramener au cas précédent par prolongement analytique de  $\hbar$  en  $e^{\pm i\pi/2} \hbar$ ).

- si  $V$  est une fonction analytique de  $x \in \mathbb{C}$ , le même argument étend la validité formelle des calculs précédents aux valeurs complexes de  $x$  par prolongement analytique en  $x$ .

- exemple typique : soit  $(V-\lambda)$  réel possédant deux zéros réels  $x_\lambda^- < x_\lambda^+$  et ayant toujours le signe de  $(x-x_\lambda^-)(x-x_\lambda^+)$  : voir figure. Une solution réelle de (IV.3) aura, dans l'intervalle  $]x_\lambda^-, x_\lambda^+[$  la forme

$$\text{Re}(u^{-1/2} e^{i\hbar^{-1} \int u dx})$$



(sinusoïde à haute fréquence si  $\hbar \rightarrow 0$ , avec modulation lente de la fréquence et de l'amplitude : cf. (IV.9-10)) ;

Pour  $x > x_\lambda^+$  elle aura la forme :

$$|u|^{-1/2} e^{+\hbar^{-1} \int |u| dx} \quad (\text{solution dominante quand } x - x_\lambda^+ \text{ croît})$$

ou bien :  $|u|^{-1/2} e^{-\hbar^{-1} \int |u| dx}$  (solution récessive (ou évanescence) quand  $x - x_\lambda^+$  croît).



Dans un voisinage de  $x_\lambda^+$  l'expression (IV.9) diverge car  $u \sim p(x)$  s'annule, et la méthode devient inopérante (les vraies solutions restent finies). On raisonne de même pour  $x < x_\lambda^-$ . On voit donc que les zéros de  $(V-\lambda)$  séparent les régions de comportement oscillant et les régions de comportement exponentiel (pour les solutions réelles) ; ces zéros sont dits points de transition ou bien points tournants (ce sont les points de retournement des trajectoires classiques), et ce sont les points singuliers pour la méthode BKW.

Cette introduction heuristique laisse subsister deux problèmes :

- il faut montrer qu'on a le droit de développer  $u$  en puissances de  $\hbar$  en majorant l'erreur ainsi commise par rapport aux vraies solutions (qu'on ne connaît pas), sinon la validité de la méthode est purement formelle.

- il faut calculer les valeurs effectives des facteurs  $b_\pm$  dans (IV.10) pour des solutions  $\psi$  spécifiées (par des conditions aux limites, par exemple). Ces facteurs n'ont aucune raison d'être constants à la traversée des points tournants et il faut pouvoir les raccorder d'une région à une autre ("connection problem").

On peut distinguer trois familles de méthodes pour traiter plus ou moins complètement ces deux problèmes :

- la méthode de Maslov (voir Maslov, Eckmann-Sénéor) utilisant la géométrie symplectique. Très profonde (surtout par ses généralisations multidimensionnelles : voir Duistermaat, Hörmander, Guillemin-Sternberg), elle est cependant très lourde à manier.

- la méthode de comparaison : on se ramène par une transformation non-linéaire à une équation de Schrödinger exactement soluble, et c'est la transformation qu'on approxime (d'une manière mal comprise). La méthode est très technique car elle exige beaucoup de connaissances sur les fonctions spéciales.

- la méthode analytique : elle exige que le potentiel soit analytique dans un voisinage complexe de la région étudiée (en  $x$ ). Comme cette condition est toujours vérifiée dans les applications, que le formalisme résultant est plus maniable et que les résultats sont plus précis, c'est la méthode que nous allons décrire en détail.

Pour une revue générale et une bibliographie très détaillée, voir Berry-Mount ; pour les détails sur la méthode BKW analytique, les livres de Heading et Fröman ; les livres d'Oliver (en particulier chapitres 6,11,13) et Dingle (chapitres 13-14) sont des traités mathématiques très exhaustifs servant de référence.

## 2. Justification rigoureuse dans le réel

Nous allons transformer l'équation de Schrödinger (IV.3) en un système du premier ordre comme au §.II.2, mais sous une forme différente. Etant donnée une fonction  $U$  (de  $x$  et de  $\hbar$ , non précisée pour le moment), nous définissons :

$$\phi_{\pm} = U^{-1/2} \exp \pm \frac{i}{\hbar} \int U dx \quad (IV.13)$$

et nous cherchons la solution générale exacte de (IV.3), c'est-à-dire de

$$\hbar^2 \psi'' + p(x)^2 \psi = 0 \quad (IV.14)$$

sous la forme :

$$\psi = b_+(x)\phi_+ + b_-(x)\phi_- \quad (IV.15)$$

(notre but sera de rendre  $b_{\pm}$  aussi peu variables que possible en ajustant  $U$ ). Comme dans la méthode de variation des constantes nous introduisons une condition auxiliaire :

$$\begin{aligned} b'_+ \phi_+ + b'_- \phi_- &= 0 \\ \Leftrightarrow b_{\pm} &= \pm W(\phi, \phi_{\mp}) / W(\phi_+, \phi_-) \end{aligned} \quad (IV.16)$$

(remarque : (IV.13)  $\Rightarrow$   $W(\phi_+, \phi_-) = -2i\hbar^{-1}$ ).

Alors l'équation (IV.14) est équivalente au système :

$$\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}' = \epsilon(x) M(x) \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} (x) \quad (IV.17)$$

$$\text{avec } \epsilon = (2i\hbar U)^{-1} \left[ p^2 - U^2 + \hbar^2 U^{1/2} (U^{-1/2})'' \right] \quad (\text{IV.18})$$

$$\text{et } M = \begin{pmatrix} -1 & -e^{-2iS/\hbar} \\ e^{2iS/\hbar} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & \\ e^{2iS/\hbar} & \end{pmatrix} (1 e^{-2iS/\hbar}) \quad (\text{IV.19})$$

$$\text{où } S = \int U dx \quad (\text{IV.20})$$

Il est immédiat que si nous savions résoudre exactement (IV.8), nous poserions  $U=u$  ; alors  $\epsilon \equiv 0 \Rightarrow b_{\pm}$  constants. Mais nous ne savons le faire qu'en puissances de  $\hbar$ , nous prendrons donc :

$$U = U_{2N} = \sum_0^N u_{2n} \hbar^{2n} \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{IV.21})$$

et nous utilisons l'équation (IV.17) (impossible à intégrer par quadratures) pour majorer l'erreur ainsi commise. Comme au §.II.2, nous déduisons de (IV.17) :

$$\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} (x') = F(x', x'') \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} (x'') \quad (x' > x'') \quad (\text{IV.22})$$

$$F(x', x'') = T \exp \int_{x''}^{x'} \epsilon(x) M(x) dx = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} F_n(x', x'') \quad (\text{IV.23})$$

$$F_n(x', x'') = \int_{x'' < x_1 < \dots < x_n < x'} dx_1 \dots dx_n \epsilon_n \dots \epsilon_1 M_n \dots M_1 \quad (\text{IV.24})$$

avec la notation  $\epsilon_j = \epsilon(x_j)$ ,  $M_j = M(x_j)$  et ainsi de suite.

(exercice :  $\det F(x', x'') \equiv 1$ ). Les matrices  $M$  étant de rang 1, on a :

$$M_n \dots M_1 = \left\{ \prod_{k=1}^{n-1} \left[ \exp \frac{2i}{\hbar} (S_k - S_{k+1}) - 1 \right] \right\} \begin{pmatrix} -1 & \\ e^{2iS_n/\hbar} & \end{pmatrix} (1 e^{-2iS_1/\hbar}) \quad (\text{IV.25})$$

Si l'intervalle  $[x'', x']$  ne contient pas de zéros de  $U$  (voisins des zéros de  $p$  si  $U = U_N$  et  $\hbar \rightarrow 0$ ) la série (IV.23) converge, mais il reste encore à contrôler sa somme pour  $\hbar \rightarrow 0$ .

Théorème 1 : Si  $p(x)^2 > 0$  sur tout l'intervalle compact  $[x'', x']$ , alors les deux expressions (IV.13) avec  $U = U_N$  approximent des solutions de (IV.14) modulo  $O(h^{2N+1})$  uniformément dans  $[x'', x']$ .

Preuve : par construction l'approximant  $U_N$  vérifie

$$p^2 - U_N^2 + h^2 U_N^{1/2} (U_N^{-1/2})'' = O(h^{2N+2}) \quad (IV.26)$$

et ce uniformément sur les compacts en  $x$ . Donc  $\varepsilon = O(h^{2N+1})$  d'après (IV.18), et (IV.25) implique, les  $S_k$  étant réels :

$$|M_n \dots M_1| \leq 2^{n-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (n \geq 1) \quad (IV.27)$$

où nous écrivons abusivement pour des matrices :  $|A| \leq B$  pour signifier  $|A_{ij}| \leq B_{ij} \forall i, j$  (valeur absolue et majoration élément par élément).

La majoration de (IV.23) comme au §.II.2 donne :

$$|F(x', x'') - \mathbb{1}| \leq \frac{1}{2} \left[ \exp 2h^{-1} \int_{x''}^{x'} |\varepsilon| dx - 1 \right] \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (IV.28)$$

et le crochet est  $O(h^{2N+1})$ . Donc  $b_{\pm}$  sont constants (cf. (IV.22)) modulo des termes d'ordre  $h^{2N+1}$  uniformément bornés sur les compacts en  $x'$ , et on en déduit le résultat annoncé. Nous avons donc prouvé que l'approximation BKW est asymptotiquement correcte à tout ordre en  $h$  (voir Appendice 1) dans toute région classiquement permise et connexe.

La situation est différente dans une région connexe interdite, où  $V > \lambda$ . Supposons pour fixer les idées que l'on a défini  $p(x) = (\lambda - V(x))^{1/2}$  avec  $\text{Im } p(x) < 0$ .

Théorème 2 : i) Si  $\text{Im } p(x) < 0$  sur tout l'intervalle compact  $[x'', x']$  alors l'expression  $\phi_+$  de (IV.13) avec  $U = U_N$  approxime une solution de (IV.14) modulo  $O(h^{2N+1})$  uniformément dans  $[x'', x']$  au sens (IV.32) ci-dessous.

Preuve : i) l'estimation (IV.26) subsiste, ainsi que :

$$\left| \exp \frac{2i}{\hbar} (S_k - S_{k+1}) \right| \underset{\hbar \rightarrow 0}{\sim} \left| \exp - \frac{2i}{\hbar} \int_{x_k}^{x_{k+1}} p \, dx \right| < 1 \quad (\text{IV.29})$$

étant donnés  $\text{Im } p < 0$  et l'ordre des variables dans (IV.24). Mais parce que le terme  $e^{2i S_n/\hbar}$  peut croître exponentiellement vite quand  $\hbar \rightarrow 0$ , (IV.27-28) sont remplacés par :

$$\left| M_n \dots M_1 \right| \leq 2^{n-1} \begin{pmatrix} 1 & |e^{-2iS_1/\hbar}| \\ |e^{2iS_n/\hbar}| & 1 \end{pmatrix} \leq 2^{n-1} \begin{pmatrix} 1 & \\ |e^{2iS(x')/\hbar}| & \end{pmatrix} (1 |e^{-2iS(x'')/\hbar}|) \quad (\text{IV.30})$$

$$\left| F(x', x'') - \mathbf{1} \right| \leq \frac{1}{2} \left[ \exp(2\hbar^{-1} \int_{x''}^{x'} |\epsilon| \, dx) - 1 \right] \begin{pmatrix} 1 & \\ |e^{2iS(x')/\hbar}| & \end{pmatrix} (1 |e^{-2iS(x'')/\hbar}|) \quad (\text{IV.31})$$

Or  $\psi(x') = (\phi_+(x') \ \phi_-(x')) \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} (x')$  par (IV.15) ; utilisant (IV.22) avec  $b_+(x'') = 1$ ,  $b_-(x'') = 0$ , on trouve alors :

$$\begin{aligned} \psi(x') - \phi_+(x') &= (\phi_+(x') \ \phi_-(x')) (F(x', x'') - \mathbf{1}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \phi_+(x') \begin{pmatrix} 1 & e^{-2iS(x')/\hbar} \end{pmatrix} (F(x', x'') - \mathbf{1}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \left| \frac{\psi(x') - \phi_+(x')}{\phi_+(x')} \right| &\leq \left[ \exp(2\hbar^{-1} \int_{x''}^{x'} |\epsilon| \, dx) - 1 \right] = O(\hbar^{2N+1}) \end{aligned} \quad (\text{IV.32})$$

La dissymétrie introduite par le théorème 2 entre  $\phi_+$  et  $\phi_-$  est fondamentale et facile à comprendre : en se propageant de  $x''$  à  $x' > x''$ ,  $\phi_+$  est multiplié par un facteur exponentiellement grand et  $\phi_-$  divisé par le même facteur. Dans une méthode d'approximation, il est impossible de fixer  $\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} (x'')$  avec assez de précision pour garantir que  $\psi$  se comporte comme  $\phi_-$  en  $x'$  car la moindre contamination de  $\psi$  par  $\phi_+$ , indécélable en  $x''$ , devient dominante en  $x'$ .

En revanche si  $x' < x''$  (propagation vers la gauche), on doit remplacer  $\phi_+$  par  $\phi_-$  dans le théorème 2.

Corollaire 1 : Les théorèmes 1 et 2 sont valables sur un intervalle quelconque ]x'', x'[ à condition que  $\int_{x''}^{x'} |\epsilon| dx < \infty$ . En effet les majorations précédentes sont alors uniformes quand  $x'' \rightarrow -\infty$  ou  $x' \rightarrow +\infty$ .

Corollaire 2 : Si  $V(x) > \lambda \forall x \in ]-\infty, x_0]$  et  $\epsilon(x) \in L^1(-\infty)$ , il existe une solution (IV.14) vérifiant pour  $x < x_0$  :

$$\psi_1(x) = \phi_+(x) (1 + \delta(x)) , \quad |\delta(x)| \leq \left[ \exp(2\hbar^{-1} \int_{-\infty}^x |\epsilon| dx) - 1 \right] \quad (IV.33)$$

done :  $\psi_1(x) \sim \phi_+(x) , \quad x \rightarrow -\infty , \quad \hbar \text{ fixé} . \quad (IV.34)$

Cela découle du corollaire 1 avec  $x'' = -\infty$ ,  $x' = x$ .

Remarque : Sous ces mêmes hypothèses, prenant  $x'' = x_0$  et  $x' = x < x''$ , le théorème 2 garantit aussi l'existence d'une solution vérifiant :

$$\psi(x) = \phi_-(x) (1 + \delta(x)) , \quad |\delta(x)| \leq \left[ \exp(2\hbar^{-1} \int_x^{x_0} |\epsilon| dx) - 1 \right]$$

mais il est impossible de contrôler sans hypothèses supplémentaires que  $\delta(x)$  a une limite pour  $x \rightarrow -\infty$ , ce qui serait nécessaire pour affirmer que  $\psi(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\sim} \text{Cte } \phi_-(x)$  : on retrouve la dissymétrie entre  $\phi_+$  et  $\phi_-$ .

Pour éviter toute confusion nous reprenons cette situation sous forme d'un problème de propagation vers la droite : nous supposons  $V(x) > \lambda \forall x \in [x_1, +\infty[$  et  $\epsilon(x) \in L^1(+\infty)$  ; le corollaire 2 nous donne une solution :

$$\psi_2(x) \sim \phi_-(x) \text{ pour } x \rightarrow +\infty \quad (IV.35)$$

et nous cherchons une solution ayant le comportement complémentaire.

Corollaire 3 : Si de plus  $p(x) \notin L^1(+\infty)$ , alors il existe des solutions de (IV.14) vérifiant :

$$\psi(x) \sim \phi_+(x) , \quad x \rightarrow +\infty , \quad \hbar \text{ fixé} . \quad (IV.36)$$

Preuve : Nous allons établir que pour  $x \rightarrow +\infty$ , la matrice  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-2iS(x)/\hbar} \end{pmatrix} F(x, x'')$  a une limite, de la forme  $\begin{pmatrix} \alpha(x'') & \beta(x'') \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ . Cela impliquera  $e^{-iS(x)/\hbar} b_-(x) \rightarrow 0$  et  $b_+(x) \rightarrow \alpha b_+(x'') + \beta b_-(x'')$ , nombre qu'on peut rendre non nul en prenant  $x''$  assez grand,  $b_-(x'') = 0$ ,  $b_+(x'') \neq 0$ . Alors  $\alpha^{-1} \psi(x) = \alpha^{-1} \phi_+(x) (b_+ + e^{-2iS/\hbar} b_-) \sim \phi_+(x) (x \rightarrow +\infty)$ . CQFD.

Pour établir la limite, nous récrivons le terme général (IV.24) de la série donnant  $F(x, x'')$  :

$$F_n(x, x'') = \int_{x''}^x dx_n \varepsilon_n \left[ \int_{x''}^{x_n} dx_{n-1} \dots \int_{x''}^{x_2} dx_1 \varepsilon_{n-1} \dots \varepsilon_1 M_n \dots M_1 \right] \quad (n \geq 1)$$

$$\Rightarrow |F_n| \leq \int_{x''}^x dx_n \varepsilon(x_n) \left[ \frac{1}{(n-1)!} \left( 2 \int_{x''}^{\infty} |\varepsilon| dx \right)^{n-1} \begin{pmatrix} 1 \\ |e^{2iS_n/\hbar}| \end{pmatrix} \left( 1 |e^{-2iS(x'')/\hbar}| \right) \right]$$

(en utilisant (IV.30) d'une part, et l'hypothèse  $\varepsilon(x) \in L^1(+\infty)$  d'autre part)

$$\Rightarrow \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-2iS(x)/\hbar} \end{pmatrix} F_n(x, x'') \right| \leq$$

$$\frac{\left( 2 \int_{x''}^{\infty} |\varepsilon| dx \right)^{n-1}}{(n-1)!} \int_{x''}^x dx_n \varepsilon(x_n) \begin{pmatrix} 1 \\ |e^{\frac{2i}{\hbar} [S(x_n) - S(x)]}| \end{pmatrix} \left( 1 |e^{-2iS(x'')/\hbar}| \right)$$

Pour tout  $\delta > 0$  il existe  $\bar{x} > x''$  tel que  $\int_{\bar{x}}^{\infty} |\varepsilon| dx < \delta$  puis, grâce à  $p(x) \notin L^1(+\infty)$  (et  $\text{Im } p < 0$ ), il existe  $x > \bar{x}$  tel que  $\left| \exp \frac{2i}{\hbar} [S(\bar{x}) - S(x)] \right| < \delta$ .

Alors :

$$\left| \int_{x''}^{\bar{x}} dx_n \varepsilon(x_n) \begin{pmatrix} 1 \\ |e^{\frac{2i}{\hbar} [S(x_n) - S(x)]}| \end{pmatrix} \left( 1 |e^{-2iS(x'')/\hbar}| \right) \right| \leq \int_{x''}^{\bar{x}} |\varepsilon| dx_n \left( \frac{1}{\delta} \right) \left( 1 |e^{-2iS(x'')/\hbar}| \right)$$

$$\left| \int_{\bar{x}}^x dx_n \varepsilon(x_n) \begin{pmatrix} 1 \\ |e^{\frac{2i}{\hbar} [S(x_n) - S(x)]}| \end{pmatrix} \left( 1 |e^{-2iS(x'')/\hbar}| \right) \right| \leq \delta \left( \frac{1}{1} \right) \left( 1 |e^{-2iS(x'')/\hbar}| \right)$$

Donc  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-2iS(x)/\hbar} \end{pmatrix} F_n(x, x'') \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_n(x'') & \beta_n(x'') \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$  et, les estimations étant uni-

formes en  $x$  :  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-2iS(x)/\hbar} \end{pmatrix} F(x, x'') \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha(x'') & \beta(x'') \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$  avec  $|\alpha(x'') - 1| <$

$\frac{1}{2} \left[ \exp 2 \int_{x''}^{\infty} |\varepsilon| dx - 1 \right]$  donc  $\alpha(x'') \neq 0$  pour  $x''$  assez grand. CQFD.

Sous l'hypothèse du corollaire 3 les deux solutions vérifiant (IV.35) et (IV.36) sont indépendantes ; la première est récessive (exponentiellement décroissante pour  $x \rightarrow +\infty$ ) et définie de manière unique ; la seconde est dominante (exponentiellement croissante) mais non unique ( $\psi + c \psi_2 \sim \phi_+$   $\forall c \in \mathbb{C}$ ).

Les théorèmes 1-2 et surtout les corollaires sont fondamentaux pour l'interprétation et l'utilisation de la méthode BKW. En effet dès que l'on veut faire une théorie asymptotique en  $\hbar$ , alors (IV.14) est une équation avec un paramètre  $\hbar$  dont la solution générale dépend de  $\hbar$  et de deux constantes d'intégration. Une solution particulière  $\psi(x, \hbar)$  n'aura un comportement intéressant pour  $\hbar \rightarrow 0$  que si sa spécification a une dépendance en  $\hbar$  raisonnable ; exemple : des données de Cauchy indépendantes de  $\hbar$ . Mais pour des problèmes indépendants du temps les données de Cauchy ne sont pas des données naturelles, et en mécanique quantique elles sont physiquement irréalistes (exception : dans un potentiel pair, la donnée de Cauchy

$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  ou bien  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  fixe la parité de  $\psi$ ). Les bonnes données sont des conditions aux limites pour  $x \rightarrow \pm\infty$ , par exemple  $\psi \in L^2(\pm\infty)$  ou bien condition d'onde entrante (sortante) pour un problème de diffusion. Les corollaires signifient que les expressions (IV.13) gouvernent simultanément d'une manière compatible le comportement asymptotique des solutions pour  $x \rightarrow \pm\infty$  à  $\hbar$  fixé et pour  $\hbar \rightarrow 0$  à  $x$  fixé (asymptotique mixte ou "compound asymptotics").

Proposition : Une condition suffisante pour que les corollaires 1-3 soient applicables à  $\pm\infty$  est que pour  $x \rightarrow \pm\infty$  :

$$p^2(x) < -C < 0 \text{ et } p'/p \in L^2, p''/p \in L^1 \quad (\text{IV.37})$$



Par exemple  $|p'/p| < C_1 |x|^{-1}$ ,  $|p''/p| < C_2 |x|^{-2}$ .

On montre de même que la condition de type "symbole" :

$$p^2 < C < 0 \text{ et } |p^{(\alpha)}/p| < C_\alpha |x|^{-\alpha} \quad \forall \alpha \geq 1, \quad |x| \rightarrow \infty \quad (\text{IV.38})$$

implique que les corrections successives en puissances de  $\hbar^2$  à  $\phi_\pm$  (obtenues en prenant  $U = U_N$ ,  $N$  quelconque) engendrent également le développement asymptotique pour  $x \rightarrow \infty$  de la solution considérée ; en d'autres termes, les équivalences (IV.34-36) sont aussi valables au sens  $x \rightarrow \infty$  ( $\pm \infty$  suivant le cas) à tous les ordres en  $x^{-1}$ ,  $\hbar$  étant fixé. Exemple fondamental : (IV.38) est vérifié pour  $V$  polynôme de degré  $2p$  avec  $V^{(2p)} > 0$  et  $\lambda$  arbitraire.

- Application au problème de valeurs propres : avec les notations du chapitre précédent nous nous restreignons au domaine d'énergie  $\lambda \in \Lambda_+ \cap \Lambda_-$ , c'est-à-dire  $p(x)^2 = \lambda - V(x) < -C < 0$  pour  $|x| \rightarrow \infty$  ; nous savons que le spectre dans cette région se compose uniquement de valeurs propres. Nous supposons en outre que les deux autres conditions (IV.37) sont satisfaites. D'après le corollaire 2, pour tout  $\lambda$  il existe une solution  $\psi_+(x, \lambda)$  récessive :

$$\psi_+(x, \lambda) \sim |p|^{-1/2} \exp \frac{1}{\hbar} \int_{x_0} |p| dx \quad (x \rightarrow -\infty) \quad (\text{IV.39})$$

et d'après le corollaire 3 toute solution indépendante a le comportement complémentaire  $|p|^{-1/2} \exp -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0} |p| dx$  dominant (pour  $x \rightarrow -\infty$ ). Donc  $\psi_+$  est la seule solution dans  $L^2(-\infty)$ . De même il existe une base de solutions formée d'une solution récessive à  $+\infty$  :

$$\psi_-(x, \lambda) \sim |p|^{-1/2} \exp -\frac{1}{\hbar} \int |p| dx \quad (x \rightarrow +\infty) \quad (\text{IV.40})$$

et d'une solution dominante. Donc la solution  $\psi_+$  caractérisée par (IV.39) vérifie pour  $x \rightarrow +\infty$  :

$$\psi_+(x, \lambda) \sim a(\lambda) |p|^{-1/2} \exp \frac{1}{\hbar} \int_{x_0} |p| dx \quad (\text{IV.41})$$

avec 
$$W(\psi_-, \psi_+) = 2\hbar^{-1} a(\lambda) \quad (\text{IV.42})$$

à moins que  $a(\lambda) = 0$ , condition nécessaire et suffisante pour que  $\psi_+ = c\psi_- \iff \psi_+ \in L^2(\mathbb{R})$ . Nous appelons  $a(\lambda)$  la fonction de Jost de l'opérateur  $\hat{H}$  ; c'est une fonction analytique ( $\psi_{\pm}$  sont fonctions entières de  $\lambda$ ) ; ses zéros réels sont les valeurs propres de  $H$ .

Notre but sera d'extraire le maximum d'information sur  $a(\lambda)$  par la méthode BKW (il est sous-entendu que  $a$  dépend aussi de  $\hbar$ ). Malheureusement, pour les  $\lambda$  candidats à être valeurs propres, la fonction  $(V-\lambda)$  a des zéros réels, et nous ne savons pas à ce stade prolonger l'information asymptotique (IV.39) à travers ces zéros afin d'en déduire le comportement de  $\psi_+$  pour  $x \rightarrow +\infty$  (rappelons que la méthode BKW diverge sur ces zéros).

Nous commençons par un résultat plus limité.

Proposition : Pour  $\lambda \rightarrow -\infty$  à  $\hbar$  fixé, ou bien pour  $\lambda < \inf V$  fixé et  $\hbar \rightarrow 0$ , la fonction de Jost admet le développement :

$$a(\lambda) \sim \exp \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (u-p) dx = \exp i \sum_{n=1}^{\infty} \hbar^{2n-1} \int_{-\infty}^{\infty} u_{2n} dx \quad (IV.43)$$

sous les hypothèses (IV.38) ; cf. définition (IV.11) pour  $u$ , avec la détermination  $\text{Im } p(x) < 0 \forall x \in \mathbb{R}$ .

En effet, le théorème 2 s'applique uniformément sur tout l'axe réel et fournit des résultats asymptotiques pour  $\frac{V-\lambda}{\hbar} \rightarrow +\infty$ . En termes de la solution  $u$  de l'équation (IV.8) :

$$\begin{aligned} \psi_+ &= u^{-1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{-\infty}^{x_0} (u-p) + \int_{x_0}^x u \right] \\ &\sim p^{-1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{-\infty}^{x_0} (u-p) dx + \int_{x_0}^{\infty} (u-p) dx + \int_{x_0}^x p dx \right] \end{aligned}$$

d'où la formule (IV.43).

Exemple : pour l'oscillateur harmonique  $\hat{H} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + x^2$  :

$$u = p + \hbar^2 \left( \frac{1}{4p^3} + \frac{5x^2}{8p^5} \right) + O(\hbar^4) \quad (\text{cf. (IV.12)})$$

$$\Rightarrow a(\lambda) = \exp \left[ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{1}{4p^3} + \frac{5x^2}{8p^5} \right) dx + O(\hbar^3) \right]$$

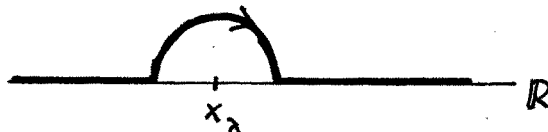
$$= \exp \left\{ \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{4} (|\lambda|+x^2)^{-3/2} - \frac{5x^2}{8} (|\lambda|+x^2)^{-5/2} \right] dx + O(\hbar^3) \right\}$$

$$a(\lambda) = \exp \left\{ \frac{\hbar}{12|\lambda|} + O(\hbar^3) \right\} = 1 + \frac{\hbar}{12|\lambda|} + \frac{\hbar^2}{288|\lambda|^2} + O(\hbar^3) \quad (\text{IV.44})$$

(en fait, le reste est  $O(\hbar^3/|\lambda|^3)$ ).

### 3. La méthode BKW dans le complexe

La manière la plus simple de raccorder deux solutions asymptotiques définies de part et d'autre d'un point tournant  $x_\lambda \in \mathbb{R}$  est de faire un détour dans le plan complexe de la variable  $x$  (voir figure).



Il faut pour cela supposer que le potentiel  $V$  est analytique dans la région en  $x$  considérée ; en fait dans les applications nous prendrons  $V$  polynômial afin d'avoir un contrôle global des solutions complexes : (zéros complexes de  $(V-\lambda)$  en nombre fini - on leur étend l'appellation de points tournants - et croissance tempérée de  $V$  pour  $|x| \rightarrow \infty$ ,  $\text{Arg } x$  quelconque).

Les expressions formelles  $\phi_\pm$  données par (IV.13) se prolongent analytiquement à  $x$  complexe, mais une détermination donnée de  $p(x) = (\lambda - V(x))^{1/2}$  est changée en son opposée lorsqu'on la prolonge le long d'un lacet simple encerclant un point tournant simple  $x_\lambda$  (tous les points tournants réels ou complexes seront supposés zéros simples de  $V-\lambda$ ). Plus précisément au voisinage de  $x_\lambda$ ,  $p$  est fonction holomorphe impaire de  $(x-x_\lambda)^{1/2}$  ; lorsque  $x$  décrit un lacet encerclant positivement  $x_\lambda$  :

$$\text{Arg } p(x) \text{ tourne de } +\pi ; \text{Arg } p(x)^{-1/2} \text{ tourne de } -\pi/2 \quad (\text{IV.45})$$

et les expressions formelles  $u = \sum_0^{\infty} u_{2n} h^{2n}$  et  $u^{-1/2}$  se transforment respectivement

de la même manière. Le prolongement de  $\phi_+$  autour d'un tel lacet devient donc proportionnel à  $\phi_-$  (non prolongé) et réciproquement (nous verrons cela plus précisément avec les formules de raccordement). Ce fait nous impose d'être très précis dans la définition de l'exposant  $\pm \int u dx$  dans  $\phi_{\pm}$  : il faut expliciter l'origine (arbitraire)  $x_0$  du chemin d'intégration (d'extrémité  $x$ ) et la classe d'homotopie de ce chemin dans le plan complexe privé des points tournants (= points de ramification de  $p$ ). Pour le deuxième point, on peut par exemple tracer une coupure depuis chaque point tournant jusqu'à l'infini et interdire au chemin d'intégration de traverser les coupures ; tous les objets considérés ( $p, u, \phi_+, \phi_- \dots$ ) sont alors définis sans ambiguïté comme fonctions uniformes de  $x$  dans le plan coupé, une fois que l'on a fixé en un point, par exemple en  $x_0$ , la détermination de  $p(x_0)^{-1/2} = (\lambda - V(x_0))^{-1/4}$ .

Ces précautions de langage étant prises, nous pouvons étudier la validité des expressions (IV.13) en tant qu'approximations des solutions de l'équation de Schrödinger dans le domaine complexe.

Il est d'abord facile d'étendre dans le complexe les démonstrations des théorèmes 1 et 2 à condition de remplacer l'intervalle  $]x'', x' [$  par un arc de courbe orienté  $\Gamma$  d'origine  $x''$  et d'extrémité  $x'$  ; l'arc peut aller à l'infini à condition que  $\int_{\Gamma} |\epsilon(x)| \cdot |dx| < \infty$ .

Théorème 3 (analogue du théorème 2) : Si  $\text{Im}(p dx) \leq 0$  le long de  $\Gamma$  ( $dx$  étant l'élément d'arc orienté de  $\Gamma$ ), alors l'expression  $\phi_+$  approxime uniformément sur  $\Gamma$  une solution de (IV.14) au sens :

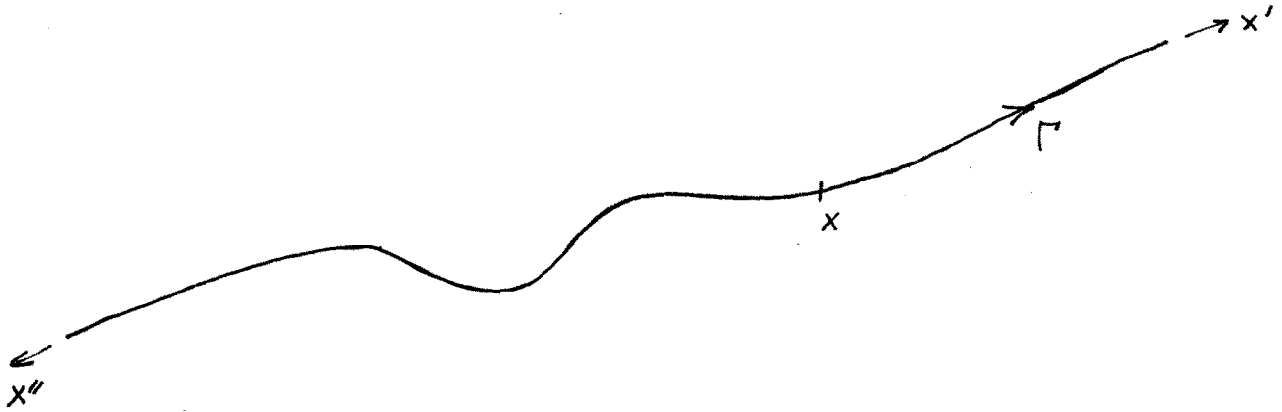
$$\psi(x) = \phi_+(x) (1 + \delta(x))$$

(IV.46)

avec  $|\delta(x)| \leq [\exp 2\mathcal{K}^{-1} \int_{x''}^x |\epsilon| dx - 1]$ .

(cf. Olver, chapitre 5, §.11). Comme dans le réel, (IV.46) signifie que la propriété de  $\phi_+$  d'approximer une solution de Schrödinger ne se propage que dans les directions complexes où  $\phi_+$  domine (dans les directions opposées c'est  $\phi_-$  qui approxime une solution ; ce n'est que dans les directions où  $\text{Im}(p dx) = 0$  que les deux expressions peuvent être utilisées en même temps).

Nous obtenons les analogues des corollaires 2 et 3 en supposant les extrémités de  $\Gamma$  à l'infini et  $\int_{\Gamma} |\varepsilon dx| < \infty$  ; nous posons  $S = \int p dx$ .



Corollaire 4 : Il existe une solution de Schrödinger récessive pour  $x \rightarrow x''$ , unique à un facteur près :

$$\psi_1(x) \sim \phi_+(x) , \quad x \rightarrow x'' , \quad x \in \Gamma$$

(et de même une solution  $\psi_2 \sim \phi_-(x)$ ,  $x \rightarrow x'$ , récessive pour  $x \rightarrow x'$ ).

Corollaire 5 : Si de plus  $\text{Im } S(x) \rightarrow +\infty$  pour  $x \rightarrow x''$ , toute solution indépendante de  $\psi_1$  a le comportement dominant :

$$\psi(x) \sim C \phi_-(x) , \quad x \rightarrow x'' , \quad x \in \Gamma , \quad C \neq 0$$

(de même toute solution indépendante de  $\psi_2$  vérifie  $\psi(x) \sim C' \phi_+(x)$ ,  $x \rightarrow x'$ ,  $C' \neq 0$ , si  $\text{Im } S(x) \rightarrow -\infty$  pour  $x \rightarrow x'$ ).

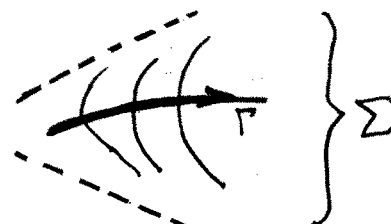
La condition  $\text{Im } S(x) \rightarrow \pm \infty$  limite les directions asymptotiques le long desquelles il existe des solutions dominantes ; l'analyse est simple si  $V$  est un polynôme de degré  $n$ ,  $V = a_n x^n + \dots$ . Alors  $p(x) \sim (-a_n x^n)^{1/2}$ ,  $S(x) \sim (-a_n)^{1/2} (\frac{n}{2} + 1)^{-1} x^{n/2+1}$ . Les directions à l'infini d'équation :

$$(n + \frac{1}{2}) \text{Arg } x + \text{Arg}(-a_n)^{1/2} = 0 \pmod{\pi} , \quad (\text{IV.47})$$

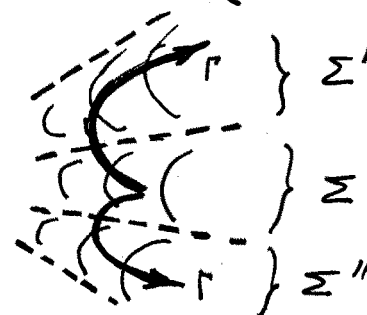
appelées directions principales, découpent alors un voisinage de l'infini en  $(n+2)$  secteurs angulaires égaux dans lesquels, alternativement,  $\phi_+$  et  $\phi_-$  décrivent le comportement des solutions dominantes.

Une forme du problème de raccordement peut alors s'énoncer ainsi : étant donnée une solution de Schrödinger  $\psi \sim \phi_+$  (ou  $\phi_-$ ) dans un secteur, peut-on calculer son comportement dans les autres secteurs ? En particulier dans le problème aux valeurs propres, on a besoin de raccorder le secteur contenant l'axe réel  $< 0$  à celui contenant l'axe réel  $> 0$ . Le théorème 3 ne répond pas à cette question car il est en général impossible de raccorder deux secteurs par une courbe orientée  $\Gamma$  le long de laquelle  $\text{Im } S$  est monotone. Supposons par exemple  $\psi = \phi_+$  dans un secteur donné  $\Sigma$  ; alors les arcs  $\Gamma$  permis par le théorème 3 sont ceux issus de  $\Sigma$  le long desquels  $\text{Im } S$  décroît. Deux cas se présentent (les figures montrent les lignes de niveau de  $\text{Im } S$ ) :

a)  $\phi_+$  domine dans  $\Sigma$  : alors tous les arcs  $\Gamma$  restent dans  $\Sigma$  et on ne peut rien dire sur  $\psi$  dans les autres secteurs.



b)  $\phi_+$  est récessive dans  $\Sigma$  : alors les arcs  $\Gamma$  peuvent aller dans l'un ou l'autre des deux secteurs adjacents à  $\Sigma$ , où  $\phi_+$  domine :  $\Sigma'$  et  $\Sigma''$ . On en déduit que la relation  $\psi \sim \phi_+$  se propage à  $\Sigma'$  et  $\Sigma''$ .



La différence entre a) et b) reflète encore la dissymétrie entre solutions dominantes et récessives. Dans le cas a) on peut ajouter à  $\psi$  n'importe quelle solution récessive dans  $\Sigma$ , qui deviendra dominante dans les secteurs adjacents, sans changer  $\psi \sim \phi_+$  dans  $\Sigma$  ; dans le cas b)  $\psi$  est déterminée de manière unique par  $\psi \sim \phi_+$ . Dans le cas a) on peut aussi spécifier une solution de manière unique par une condition asymptotique du type :

$$\psi \sim b_+ \phi_+ + b_- \phi_- \quad (x \rightarrow \infty, x \in \bar{\Sigma} \cap \bar{\Sigma}' \text{ (direction principale) })$$

qui est équivalente à la paire de conditions :

$$\psi \sim b_+ \phi_+ \text{ dans } \Sigma \text{ et } \psi \sim b_- \phi_- \text{ dans } \Sigma' .$$

Dans tout ce qui précède, nous avons supposé que (les coupures ont été placées de telle sorte que) nous n'avions jamais à traverser de coupure.

En résumé, on peut prolonger une approximation BKW dans toutes les régions où elle n'est pas exponentiellement dominée, soit parce qu'elle est elle-même dominante, soit parce que les termes pouvant la dominer sont interdits. C'est le principe de dominance exponentielle (Berry et Mount, §.3). Bien que ce principe soit insuffisant pour résoudre le problème de raccordement le plus général, il permet de traiter quelques cas simples mais fondamentaux.

- Problème à un point tournant : potentiel linéaire  $V(x) = x$

$$- \hbar^2 \psi'' + x\psi = \lambda\psi$$

Par les changements de variable  $x \rightarrow x+\lambda$  puis  $x \rightarrow \hbar^{2/3}x$  nous nous ramenons à  $\lambda = 0$  puis  $\hbar = 1$ , les développements BKW en  $\hbar^2$  se lisent comme développements en  $x^{-3}$ ,  $|x| \rightarrow \infty$  :

$$- \psi'' + x\psi = 0 \tag{IV.48}$$

$x = 0$  est l'unique point tournant. Les solutions ont, d'après le §.2, les comportements (avec  $p = (-x)^{1/2}$ ) :

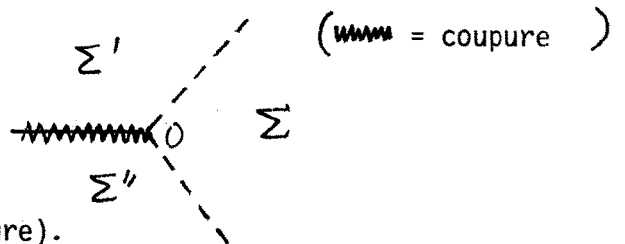
$$\psi \sim c|p|^{-1/2} \exp \pm \int |p| dx = c x^{-1/4} \exp \pm \left( \frac{2}{3} x^{3/2} \right) \quad x \rightarrow + \infty$$

$$\psi \sim b_+ \phi_+ + b_- \phi_- \sim |x|^{-1/4} \left( b_+ \exp + \frac{2i}{3} |x|^{3/2} + b_- \exp - \frac{2i}{3} |x|^{3/2} \right) \quad x \rightarrow - \infty$$

La plus intéressante est la solution réelle  $\psi_+$  récessive pour  $x \rightarrow + \infty$  (c'est la seule solution tempérée) ; à des facteurs près, c'est la fonction d'Airy (cf. appendice 5). Problème : calculer son comportement pour  $|x| \rightarrow \infty$ , Arg  $x$  quelconque.

Réponse : les directions principales

$$\text{Im}(-x)^{3/2} = 0 \iff \text{Arg } x = \pi \pm \frac{2\pi}{3}$$



délimitent trois secteurs  $\Sigma$ ,  $\Sigma'$ ,  $\Sigma''$  (voir figure).

Par hypothèse  $\psi_+$  est récessive dans  $\Sigma$  : par le principe de dominance exponentielle elle conserve donc la même forme asymptotique dans les deux secteurs adjacents, la coupure étant placée sur  $\bar{\Sigma}' \cap \bar{\Sigma}''$  de façon à ne pas être traversée :

$$\psi_+ \sim x^{-1/4} \exp - \frac{2}{3} x^{3/2} \quad |\text{Arg } x| < \pi \tag{IV.49}$$

Les deux secteurs  $\Sigma'$  et  $\Sigma''$  étant eux-mêmes adjacents, (IV.49) détermine enfin le comportement de  $\psi_+$  sur leur frontière commune :

$$\psi_+ \sim (x+i0)^{-1/4} \exp - \frac{2}{3} (x+i0)^{3/2} + (x-i0)^{-1/4} \exp - \frac{2}{3} (x-i0)^{3/2} \quad (x \rightarrow -\infty)$$

et en explicitant ces valeurs au bord sur la coupure :

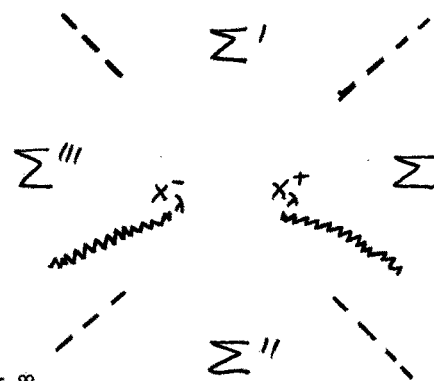
$$\psi_+ \sim |x|^{-1/4} \left[ e^{-i\pi/4} \exp \frac{2i}{3} |x|^{3/2} + e^{i\pi/4} \exp - \frac{2i}{3} |x|^{3/2} \right] \quad (x \rightarrow -\infty) \quad (IV.50)$$

Cet exemple montre déjà le changement de forme obligatoire d'un développement asymptotique d'un secteur à un autre (phénomène de Stokes). Nous n'avons donné ici que les termes principaux des développements ; les corrections en puissances de  $x^{-3}$  s'obtiennent en employant la fonction  $u = \sum u_{2n} h^{2n}$  au lieu de  $p$ .

- Problème à deux points tournants : valeurs propres de l'oscillateur harmonique  $V(x) = x^2$ . Nous cherchons les solutions dans  $L^2(\mathbb{R})$  de

$$- h^2 \psi'' + (x^2 - \lambda) \psi = 0 \quad (IV.51)$$

en nous limitant à  $\lambda > 0$  d'après la discussion générale du §.III.3. Il y a deux points tournants  $x_\lambda^\pm = \pm \sqrt{\lambda}$  ; nous choisissons la détermination où  $p(x) = \sqrt{\lambda - x^2}$  et  $p^{-1/2}$  sont positifs pour  $-\lambda < x < \lambda$ , en rejetant par exemple les coupures dans le 1/2-plan inférieur.



D'après le §.2, les solutions de (IV.51) ont le comportement :

$$\psi \sim c(x^2 - \lambda)^{1/4} \exp \pm h^{-1} \int (x^2 - \lambda) dx \quad |x| \rightarrow \infty$$

Donc les solutions dans  $L^2$  sont les solutions récessives pour  $x \rightarrow +\infty$  et  $-\infty$ . La figure montre les 4 secteurs angulaires à l'infini délimités par les directions

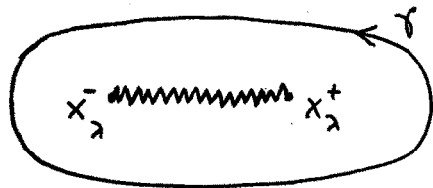
$\text{Arg } x = \frac{\pi}{4} + \frac{n\pi}{2}$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ . Nous suivons alors (pour  $\lambda$  arbitraire) la solution réelle récessive pour  $x \rightarrow +\infty$  (remarque :  $\text{Arg } p^{-1/2} = \frac{\pi}{4}$  pour  $x > x_\lambda$ ) :

$$\psi \sim e^{-i\pi/4} \phi_- \quad x \rightarrow \infty, \quad x \in \Sigma \quad (IV.52)$$



Cette forme asymptotique se prolonge donc au secteur adjacent  $\Sigma'$  où elle est dominante, mais en général pas au secteur suivant  $\Sigma''$  où elle deviendrait à nouveau sous-dominante. Cependant si  $\lambda$  est valeur propre, alors  $\psi \in L^2(-\infty)$  et il ne peut y avoir de terme dominant dans  $\Sigma''$ , donc (IV.52) se prolonge aussi à  $\Sigma''$ . Quant au demi-plan inférieur, le plus simple est de prolonger le comportement de  $\psi$  pour  $\text{Im } x \geq 0$  par réflexion de Schwarz : les deux coupures précédentes disparaissent mais il en naît une nouvelle sur  $[x_\lambda^-, x_\lambda^+]$ ,  $\phi_-$  n'étant pas réelle sur cet intervalle. Finalement on doit avoir  $\psi \sim e^{-i\pi/4} \phi_-$  uniformément en  $\text{Arg } x$  ; utilisant le caractère asymptotique mixte de la méthode, on montre aussi que :

$$\psi \sim e^{-i\pi/4} \phi_- \text{ pour } h \rightarrow 0$$



et ce uniformément en  $x$  à distance finie.

Mais nous allons voir que la compatibilité

de cette approximation avec le caractère analytique de la vraie solution  $\psi$  n'est réalisée que pour des valeurs discrètes de  $\lambda$ . Soit en effet  $\gamma$  un lacet simple encerclant positivement la coupure  $[x_\lambda^-, x_\lambda^+]$ . L'analyticité de  $\psi$  dit que :

$$\int_\gamma \psi'/\psi dx = 2\pi i k \tag{IV.52}$$

où  $k \in \mathbb{N}$  est le nombre de zéros de  $\psi$  intérieurs à  $\gamma$ . Mais sur  $\gamma$  :

$$\frac{\psi'}{\psi} \sim \frac{\phi_-'}{\phi_-} = k^{-1} (-ip - h \frac{p'}{2p} + O(h^2))$$

uniformément en  $x$  (en nous limitant aux deux premiers termes). Donc :

$$-i \int_\gamma p dx - \frac{h}{2} \int_\gamma \frac{p'}{p} = 2\pi i k h + O(h^2).$$

Mais  $\frac{1}{2} \int_\gamma \frac{p'}{p} = \frac{1}{4} \int_\gamma \frac{(\lambda-V)'}{\lambda-V} = \frac{1}{4} (2i\pi) \cdot 2$  car  $(\lambda-V)$  a deux zéros (remarque : ce terme est la "correction de Maslov"). Quant à  $-\int_\gamma p dx$ , on peut l'évaluer en rabattant sur la coupure :

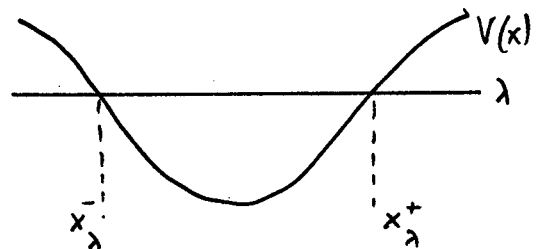
$$-\int_\gamma p dx = 2 \int_{x_\lambda^-}^{x_\lambda^+} \sqrt{\lambda-V(x)} dx = \int_0^{T(\lambda)} p(t) dx(t) \tag{IV.53}$$

la dernière intégrale étant prise le long de la trajectoire classique réelle

$\{x(t), p(t)\}$  d'énergie  $\lambda$ , sur une période  $T(\lambda)$ . C'est donc l'action classique réduite (de Maupertuis), que nous noterons  $\Sigma(\lambda)$ . Finalement :

$$\Sigma(\lambda) = 2\pi \left(k + \frac{1}{2}\right)\hbar + O(\hbar^2) \quad k \in \mathbb{N} \quad (\text{IV.54})$$

Ceci est une formule implicite pour la  $k^{\text{e}}$  valeur propre  $\lambda_k$  : la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld (et Maslov). Nous n'avons volontairement pas explicité le potentiel car cette règle est asymptotiquement valable chaque fois que le problème a deux points tournants réels (cf. figure) et que l'on peut négliger les effets des points tournants complexes ; intuitivement cela correspond à un potentiel en "puits simple", mais des conditions précises et générales sont assez laborieuses à formuler (cf. Titchmarsh chapitre VII).



Les corrections en  $\hbar$  à (IV.54) s'obtiennent automatiquement en utilisant  $u = \sum u_{2n} \hbar^{2n}$  à la place de  $p = u_0$  :

$$- \int_\gamma u \, dx = - \sum_0^\infty \left( \int_\gamma u_{2n} \, dx \right) \hbar^{2n} = 2\pi \left(k + \frac{1}{2}\right)\hbar \quad (\text{IV.55})$$

Enfin nous explicitons complètement le cas  $V = x^2$  : (IV.53) donne  $\Sigma(\lambda) = \pi\lambda$  donc  $\lambda_k \sim (2k+1)\hbar$  à l'ordre dominant. Il est remarquable que ce résultat est exact (cf. §.III.3) ; on peut aussi vérifier directement que toutes les intégrales

$\int_\gamma u_{2n} \, dx$  ( $n \geq 1$ ) sont des combinaisons d'intégrales eulériennes  $B(r,s) = \frac{\Gamma(r)\Gamma(s)}{\Gamma(r+s)}$  avec  $(r+s) \in -\mathbb{N}$  et  $r, s \notin -\mathbb{N}$ , donc  $B(r,s) \equiv 0$  (cf. (V.17) plus loin).

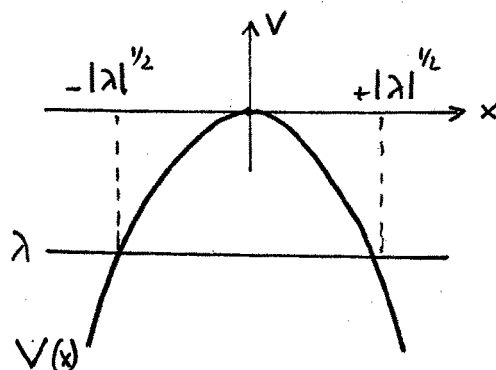
Quelques remarques pour conclure :

- (IV.55) est une formule asymptotique pour  $\hbar \rightarrow 0$  à  $\lambda$  fixé, donc aussi pour  $k \rightarrow +\infty$  dans  $\mathbb{N}$ . Cependant si  $V$  a un minimum quadratique (fonction de Morse) la formule (IV.55) sera également satisfaisante pour  $\hbar \rightarrow 0$  à  $k$  fixé, car la solution  $\psi_k$  se concentrera autour du minimum et sera surtout sensible à la partie harmonique du potentiel, pour laquelle (IV.55) est exact. Cette formule peut donc souvent donner une approximation globale du spectre étonnamment bonne. Ce fait, ainsi que le caractère analytique et assez universel du résultat expliquent que la règle de Bohr-Sommerfeld soit la formule la plus puissante et la plus utilisée dans le calcul des

valeurs propres (en se limitant presque toujours au terme principal (IV.54)):

- il faut souligner en guise de transition que nous ne savons pas encore traiter le problème de raccordement général même avec deux points tournants seulement : par exemple nous ne savons pas calculer pour tout  $\lambda$  le comportement de la solution récessive (IV.52) dans le secteur  $\Sigma'''$  opposé à  $\Sigma$ , c'est-à-dire calculer la fonction de Jost  $a(\lambda)$ , fût-ce asymptotiquement pour  $\lambda \rightarrow +\infty$  (la formule (IV.55) n'approxime que la position des zéros de  $a(\lambda)$ ).

Autre exemple : la "barrière parabolique"  $V = -x^2$  et par ex.  $\lambda < 0$  ; les principes énumérés ne permettent pas d'estimer la matrice  $F(y,x)$  pour  $x < -|\lambda|^{1/2}$ ,  $y > |\lambda|^{1/2}$ , c'est-à-dire de calculer complètement les amplitudes de transmission/réflexion pour une onde entrante.



#### 4. Formules de raccordement générales

Ces formules permettent de traiter les problèmes à un nombre fini de points tournants en position générale. Afin de les obtenir nous devons nous déplacer à distance finie dans le plan des  $x$  et donc faire une théorie asymptotique pour  $\hbar \rightarrow 0$  à  $\lambda$  fixé. Le problème de raccordement devient alors local en  $x$  et on le résout successivement autour de chaque point tournant (supposé simple).

*Définition :* On appelle lignes de Stokes (resp. anti-Stokes ou principales) les arcs issus des points tournants et le long desquels  $\text{Re } p(x)dx = 0$  (resp.  $\text{Im } p(x)dx = 0$ ).

Attention : cette notation est conforme à Berry-Mount, Dingle, Olver. Les livres de mathématiques utilisent souvent la convention opposée.

Nous introduisons aussi la notation :

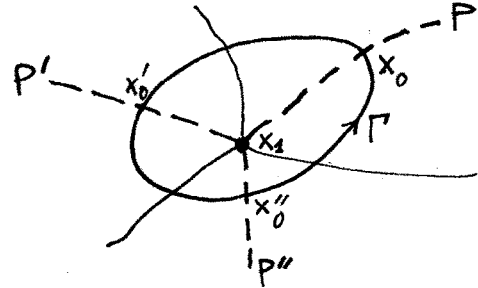
$$\phi_{\pm, x_0}(x) = U(x)^{-1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x U dx \quad (\text{IV.56})$$

dans laquelle l'origine (et sous-entendu : la classe d'homotopie dans  $\mathbb{C} \setminus \{\text{points tournants}\}$ ) du chemin d'intégration sont spécifiés ; les résultats finals ne dépendent pas des spécifications choisies. On a les formules de transformation évidentes :

$$\phi_{\pm, x_0} = \left( e_{x_0}^{x_0'} \right)^{\pm 1} \phi_{\pm, x_0'} , \quad e_{x_0}^{x_0'} = \exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_0'} U dx \quad (IV.57)$$

qui induit les formules inverses pour la transformation des coefficients  $b_{\pm}$ .

- Raccordement autour d'un point tournant : soit  $x_1$  un zéro simple de  $(V-\lambda)$  auquel se rattachent trois lignes de Stokes et trois lignes principales  $P, P', P''$ . Pour clarifier l'exposé nous choisissons l'origine  $x_0$  sur l'une de ces dernières lignes, soit  $P$ . Soit  $\psi$  une solution de Schrödinger vérifiant :



$$\psi(x) \sim b_+ \phi_{+, x_0} + b_- \phi_{-, x_0} \quad (\hbar \rightarrow 0, x \in P) \quad (IV.58)$$

Comme  $\phi_{\pm, x_0}(x) \sim p^{-1/2} \exp \pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx$  et que  $\int_{x_0}^x p dx$  est réel pour

$x_0, x \in P$ , les deux expressions  $\phi_{\pm}$  sont comparables pour  $\hbar \rightarrow 0$ , et l'isomorphisme  $\psi \leftrightarrow \{b_+, b_-\}$  est défini sans ambiguïté dans les deux sens. Le problème est de déduire de la relation (IV.59) les valeurs de  $b_{\pm}$  pour  $x \in P'$  et  $P''$  :

$$\left. \begin{aligned} \psi(x) &\sim b_+^I \phi_{+, x_0} + b_-^I \phi_{-, x_0} & (x \in P') \\ &\sim b_+^{II} \phi_{+, x_0} + b_-^{II} \phi_{-, x_0} & (x \in P'') \end{aligned} \right\} \quad (IV.59)$$

Solution : on suit l'évolution de la solution générale de l'équation de Schrödinger lorsque  $x$  parcourt un lacet  $\Gamma$  basé en  $x_0$  et entourant positivement  $x_0$  ; soient  $x_0^I = P' \cap \Gamma, x_0^{II} = P'' \cap \Gamma$ . On a :

$$\begin{pmatrix} b_+^I \\ b_-^I \end{pmatrix} = F(x_0^I, x_0) \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} , \quad \begin{pmatrix} b_+^{II} \\ b_-^{II} \end{pmatrix} = F(x_0^{II}, x_0^I) \begin{pmatrix} b_+^I \\ b_-^I \end{pmatrix}$$

En fait d'après le théorème 3,  $b_{\pm}$  sont asymptotiquement constants sur chaque ligne principale, nous noterons donc  $F(x_0^I, x_0) = F_{P', P}$  etc ...

Nous décrivons en détail le calcul de la matrice  $F_{P',P}$ , en supposant pour fixer les idées que  $\phi_+$  est l'expression dominante dans le domaine D bordé par P et P'.

Nous appliquons d'abord deux fois le principe de dominance exponentielle : le coefficient  $b_+$  de l'expression dominante ne peut changer dans D, donc  $F_{P',P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ ? & ? \end{pmatrix}$ ; et si  $b_+ = 0$  il en est de même pour le coefficient  $b_-$  dont les variations ne sont plus masquées par un terme dominant, donc  $F_{P',P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}$ ,  $\alpha$  inconnu.

Le même raisonnement s'applique dans les secteurs suivants à condition de noter que  $\phi_+$  et  $\phi_-$  alternent comme termes dominants :

$$F_{P''P'} = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_{PP''} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \gamma & 1 \end{pmatrix}.$$

Le produit  $F_{PP''} F_{P''P'} F_{P',P}$  n'est pas l'identité car le prolongement analytique de  $\phi_{\pm, x_0}(x)$  lorsque x parcourt le lacet  $\Gamma$  ne ramène pas ces expressions à leurs valeurs d'origine, mais les transforme en  $e^{-i\pi/2} \theta_{\Gamma} \phi_{\mp, x_0}$  respectivement ( $e^{-i\pi/2}$  est le gain de phase de  $u^{-1/2}$ ,  $\theta_{\Gamma} = \exp \frac{i}{\hbar} \int U dx$  est le gain de phase de  $\exp \frac{i}{\hbar} \int U dx$ , et le changement de signe de u échange  $\phi_+$  et  $\phi_-$ ). L'uniformité de la vraie solution  $\psi$  (non ramifiée) impose donc la condition de cohérence :

$$F_{PP''} F_{P''P'} F_{P',P} = \begin{pmatrix} 0 & i\theta_{\Gamma}^{-1} \\ i\theta_{\Gamma} & 0 \end{pmatrix}$$

qui se résoud immédiatement :

$$\alpha = \gamma = i \theta_{\Gamma}, \quad \beta = i \theta_{\Gamma}^{-1} \tag{IV.60}$$

Cas particulier important : si l'on se limite à l'approximation d'ordre zéro ( $U = u_0 = p$ ) on a avantage à choisir  $x_0 = x_1$  car l'intégrale  $\int U dx$  ne diverge pas en  $x_1$ . Il reste alors :

$$\alpha = \beta = \gamma = i \tag{IV.61}$$

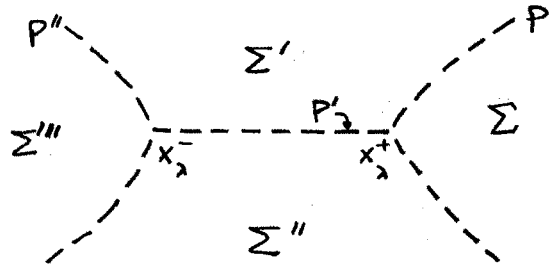
C'est la règle de Stokes : le raccordement d'une ligne principale à la suivante dans

Le sens trigonométrique s'effectue par les formules :

$$\begin{aligned}
 b_{\text{dominant}} &\rightarrow b_{\text{dominant}} \\
 b_{\text{sous-dominant}} &\rightarrow b_{\text{sous-dominant}} + i b_{\text{dominant}}
 \end{aligned}
 \tag{IV.62}$$

L'inclusion des corrections en puissances de  $\hbar$  est automatique par les formules (IV.60) ; pour un raccordement dans le sens  $\sim$ , on change  $i$  en  $(-i)$ .

- Raccordement pour deux points tournants : nous reprenons le problème aux valeurs propres (IV.51) en représentant les lignes principales : une d'elles relie les deux points tournants et les quatre autres sont asymptotiques aux directions principales précédemment définie (figure). Nous nous limitons



à l'approximation d'ordre 0 en  $\hbar$ . Nous avons vu (éq. (IV.52)) que la récessivité de  $\psi$  pour  $x \rightarrow +\infty$  impliquait  $b_+ = 0$  dans  $\Sigma$  ; décidant par exemple que :

$$\psi \sim e^{-i\pi/4} \phi_{-,x_\lambda^+} : \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} = e^{-i\pi/4} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
 \tag{IV.63}$$

cette relation se prolongeant en particulier à la ligne principale  $P$ . Comme  $\phi_-$  devient dominante dans  $\Sigma'$ , la matrice de raccordement  $F_{P',P} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ . On applique la même matrice pour passer de  $P'$  à  $P''$  après avoir pris soin de déplacer l'origine des

intégrations de  $x_\lambda^+$  à  $x_\lambda^-$  par la matrice  $\begin{pmatrix} e^{x_\lambda^-} & 0 \\ x_\lambda^+ & e^{x_\lambda^+} \\ 0 & e^{x_\lambda^-} \\ & x_\lambda^- \end{pmatrix}$  (cf. (IV.57)).

Donc sur  $P''$ ,  $\psi = b_+ \phi_{+,x_\lambda^-} + b_- \phi_{-,x_\lambda^-}$  avec :

$$\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{x_\lambda^-} & 0 \\ x_\lambda^+ & e^{x_\lambda^+} \\ 0 & e^{x_\lambda^-} \\ & x_\lambda^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} e^{-i\pi/4} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & (e^{x_\lambda^+} + e^{x_\lambda^-}) \\ e^{-i\pi/4} & e^{x_\lambda^+} + e^{x_\lambda^-} \end{pmatrix}
 \tag{IV.64}$$

En particulier pour  $x \rightarrow -\infty$  :  $\psi \sim b_+ \phi_{+,x_\lambda}^-$  (terme dominant) sauf si  $b_+ = 0$ , et (IV.64) nous fournit la valeur de  $b_+$  pour  $\lambda$  quelconque :

$$b_+ = e^{i\pi/4} \left( e^{\frac{x_\lambda^+}{x_\lambda^-}} + e^{\frac{x_\lambda^-}{x_\lambda^+}} \right), \quad e^{\frac{x_\lambda^+}{x_\lambda^-}} = \left( e^{\frac{x_\lambda^-}{x_\lambda^+}} \right)^{-1} = \exp i \int_{x_-}^{x_+} p \, dx \quad (\text{IV.65})$$

L'équation aux valeurs propres  $b_+ = 0$  redonne alors la règle de Bohr-Sommerfeld (IV.54) ; le raccordement avec corrections en puissances de  $\hbar$ , utilisant (IV.60), conduirait de même à la formule de valeurs propres (IV.55).

- Raccordement de Knoll-Schaeffer : pour apprécier les effets fins induits par la présence de plusieurs points tournants, il convient de préciser davantage les domaines de validité des coefficients  $b_\pm$  dans le plan complexe. Dans chaque domaine bordé par deux lignes principales adjacentes, le coefficient du terme sous-dominant n'est plus défini dans le cadre d'une théorie asymptotique ( $\hbar \rightarrow 0$ ). Cependant on peut lui conserver un sens et un rôle dans un calcul numérique ( $\hbar > 0$  fixé) ou bien dans une procédure plus ambitieuse où les développements asymptotiques de  $\phi_\pm$  seraient séparément renommés. La méthode de renommage la plus séduisante semble être la représentation de Borel pour  $\phi_\pm(x, \hbar = \sigma^{-1})$  (voir Appendice 4, et Dingle chap. 21). Si cette représentation est valable (ce qui est très plausible mais non prouvé), alors la variation des constantes  $b_\pm$  entre deux lignes principales adjacentes doit s'effectuer comme un saut sur la ligne de Stokes intermédiaire (cette convention est aussi adoptée par les physiciens comme un moindre mal du point de vue numérique, la discontinuité affectant le terme sous-dominant lorsque celui-ci est aussi petit que possible). Les lignes de Stokes partagent donc le plan complexe en régions dans lesquelles  $b_\pm$  sont constants. Quel que soit le nombre de points tournants on peut alors raccorder deux régions adjacentes par les formules (IV.60-62) et ainsi de proche en proche couvrir tout le plan. Restriction : cette façon de procéder n'est valable qu'en position générale des points tournants, au sens où deux tels points ne doivent pas se trouver sur la même ligne de Stokes (sinon la représentation de Borel devient ambiguë). Nous verrons dans le chapitre suivant des applications de ces formules de raccordement précisées (voir aussi l'article de Knoll-Schaeffer).

- Remarque : le problème de raccordement pour des points tournants non simples (zéros multiples de  $V-\lambda$ ) a également été étudié dans la littérature (livre de Heading, article de Olver).

V - APPLICATION DE LA METHODE BKW A QUELQUES PROBLEMES AUX VALEURS PROPRES

1. Quelques fonctions spectrales

Les valeurs propres d'un potentiel quelconque n'étant pas calculables exactement, il est utile de passer par une batterie de fonctions auxiliaires construites avec ces valeurs propres afin d'obtenir un maximum d'informations sur le spectre. Quelques fonctions spectrales de ce type s'avèrent particulièrement utiles :

$$\left. \begin{aligned}
 & - \text{fonction de partition} : \theta(t) = \text{Tr} \exp(-t\hat{H}) = \sum_0^{\infty} \exp(-t\lambda_n) \quad (\text{Re } t > 0) \\
 & - \text{trace de la r solvante} : R(\lambda) = \text{Tr}(\hat{H}-\lambda)^{-1} = \sum_0^{\infty} (\lambda_n-\lambda)^{-1} \quad (\lambda \in \mathbb{C} \setminus \sigma(\hat{H})) \\
 & - \text{d terminant de Fredholm} : \Delta(\lambda) = \det(1-\lambda\hat{H}^{-1}) = \prod_0^{\infty} (1-\lambda/\lambda_n) \quad (\lambda \in \mathbb{C}) \\
 & - \text{fonction zeta} : \zeta(s) = \text{Tr} \hat{H}^{-s} = \sum_0^{\infty} \lambda_n^{-s} \quad (\text{Re } s \geq 1)
 \end{aligned} \right\} \quad (V.1)$$

Les expressions ci-dessus convergent et d finissent des fonctions analytiques de leurs arguments dans les domaines sp cifi s   condition que  $(\hat{H}-\lambda)^{-1}$  soit   trace pour  $\lambda \notin \mathbb{R}$  ( $\Leftrightarrow \sum |\lambda_n|^{-1} < \infty$ ). Pour cela il suffit qu'en plus de conditions de r gularit  du type (IV.37), V v rifie :

$$\exists C > 0, \quad \varepsilon > 0 : V(x) \geq C |x|^{2+\varepsilon} \quad (x \rightarrow \pm \infty) \quad (V.2)$$

En effet V n'a alors qu'un spectre discret  $\{\lambda_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  tel que

$$\lambda_k > Cte \left(k + \frac{1}{2}\right)^{(4+2\varepsilon)/(4+\varepsilon)} \quad (k \rightarrow \infty) \quad (V.3)$$

(in galit  d duite de la r gle de Bohr-Sommerfeld (IV.54)) , la s rie  $\zeta(s)$  converge d'ailleurs pour  $\text{Re } s > (4+\varepsilon)/(4+2\varepsilon)$ . Dans le cas limite  $\varepsilon = 0$  il convient seulement de faire une r gularisation suppl mentaire sur  $R(\lambda)$  et  $\Delta(\lambda)$  , du type :

$$\begin{aligned}
 R(\lambda)_{\text{reg}} &= \sum_0^{\infty} \left[ (\lambda_n-\lambda)^{-1} - \lambda_n^{-1} \right] \\
 \Delta(\lambda)_{\text{reg}} &= \prod_0^{\infty} \left[ (1-\lambda/\lambda_n) \exp(\lambda/\lambda_n) \right]
 \end{aligned} \quad (V.4)$$



Cette extension a l'intérêt d'établir que plusieurs fonctions spéciales importantes de l'analyse sont des fonctions spectrales de l'oscillateur harmonique  $V = x^2$ , ce qui permet de retrouver certaines de leurs propriétés classiques dans un cadre plus général (mais nous n'avons rien obtenu de nouveau sur ces fonctions de cette manière). En effet pour  $\hat{H} = -d^2/dx^2 + x^2$ ,  $\lambda_k = 2k+1$  :

$$\left. \begin{aligned} \theta(t) &= (2 \operatorname{sh} t)^{-1} \\ R_{\text{reg}}(\lambda) &= \frac{1}{2} \left[ -\gamma 2 \log 2 - \psi\left(\frac{1-\lambda}{2}\right) \right] \\ \Delta_{\text{reg}}(\lambda) &= \sqrt{\pi} (2e^{\gamma/2})^\lambda / \Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}\right) \\ \zeta(s) &= (1 - 2^{-s}) \zeta_R(s) \end{aligned} \right\} \quad (\text{V.5})$$

où  $\psi = \Gamma'/\Gamma$ ,  $\gamma =$  constante d'Euler, et  $\zeta_R$  est la fonction zeta de Riemann.

Les relations entre les diverses fonctions spectrales d'un même  $\hat{H}$  sont très importantes (nous reprenons  $\epsilon > 0$ ) :

$$R(\lambda) = \int_0^\infty \theta(t) e^{\lambda t} dt \quad (\operatorname{Re} \lambda < 0 : \text{transformation de Laplace}) \quad (\text{V.6})$$

$$\Delta(\lambda) = \exp - \int_0^\lambda R(\lambda') d\lambda' \quad (\lambda \in \mathbb{C}) \quad (\text{V.7})$$

$$\Gamma(s) \zeta(s) = \int_0^\infty \theta(t) t^{s-1} dt \quad (\operatorname{Re} s > \frac{4+\epsilon}{4+2\epsilon} : \text{transformation de Mellin}) \quad (\text{V.8})$$

Ces relations se vérifient terme à terme sur les séries (V.1). Enfin, la fonction de Jost  $a(\lambda)$ , introduite en (IV.41-42), vérifie l'identité :

$$a(\lambda) = a(0) \exp \kappa^{-1} \int_{-\infty}^\infty -(\sqrt{V-\lambda} - \sqrt{V}) dx \cdot \Delta(\lambda) \quad (\text{V.9})$$

avec 
$$a(0) = \exp \int_{-\infty}^0 \left[ \kappa^{-1} T(\lambda) - R(\lambda) \right] d\lambda \quad (\text{V.10})$$

et  $T(\lambda) = \int_{-\infty}^\infty \frac{dx}{2\sqrt{V-\lambda}}$  est le temps que met une particule d'énergie  $(-\lambda)$  dans le potentiel  $(-V)$  pour se rendre de  $x = -\infty$  à  $x = +\infty$  (temps fini car  $(-V)$  n'est pas complet : voir chapitre II §.4).

Remarque :  $T(\lambda)$  n'est pas intégrable à  $-\infty$  et les deux termes de (V.10) ne doivent pas être dissociés.

Preuve de (V.9) : partant du noyau intégral explicite de l'opérateur résolvant  $(\hat{H}-\lambda)^{-1}$  (éq. (III.5) avec la modification  $\hbar \neq 1$ ) :

$$R(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\lambda, x, x) dx = \hbar^{-2} W(\psi_-, \psi_+)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_+(x) \psi_-(x) dx \quad (V.11)$$

En combinant les équations  $\frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_+ \left[ (\hat{H}-\lambda) \psi_- \right] = 0$  et  $\psi_- \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[ (\hat{H}-\lambda) \psi_+ \right] = 0$ , puis en formant la combinaison symétrique, nous obtenons deux expressions explicites de primitives de  $\psi_+ \psi_-$  (notation :  $' = \frac{\partial}{\partial x}$  ;  $\dot{\phantom{x}} = \frac{\partial}{\partial \lambda}$ ) :

$$\hbar^{-2} \psi_+(x) \psi_-(x) = f' = g' \quad \text{avec} \quad f = \psi_- \dot{\psi}_+ - \psi_- \dot{\psi}_+^{\dot{}} , \quad g = \psi_+ \dot{\psi}_- - \psi_+ \dot{\psi}_-^{\dot{}} .$$

Comme  $g-f = W(\psi_-, \psi_+)$ , nous pouvons écrire :

$$R(\lambda) = W(\psi_-, \psi_+)^{-1} \left[ g(\lambda, +\infty) - f(\lambda, -\infty) - \dot{W} \right] \quad (V.12)$$

Pour  $\lambda$  fixé, cette expression ne fait intervenir que les comportements asymptotiques des solutions pour  $x \rightarrow \pm \infty$ . Nous pouvons donc à ce stade introduire l'information apportée par la méthode BKW : formules (IV.39-43) pour  $\lambda < \inf_{\mathbb{R}} V$ , dont on montre en fait qu'elles sont dérivables en  $x$  et  $\lambda$ . Par exemple la formule (IV.40) :

$$\psi_-(x, \lambda) \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} |p|^{-1/2} \exp - \hbar^{-1} \int_{x_0}^x |p| , \quad |p| = \sqrt{V-\lambda}$$

et  $\psi_-'(x, \lambda) \sim - \hbar^{-1} |p|^{1/2} \exp - \hbar^{-1} \int_{x_0}^x |p|$

$$\dot{\psi}_-(x, \lambda) \sim \hbar^{-1} |p|^{-1/2} \int_{x_0}^x \frac{1}{2|p|} \exp - \hbar^{-1} \int_{x_0}^x |p|$$

(en négligeant les corrections supérieures, dont les effets s'annuleront à l'infini).

De toutes les formules similaires déduites de (IV.39-41), nous tirons :

$$g(\lambda, +\infty) \sim a(\lambda)h^{-2} \int_{x_0}^{\infty} \frac{dx}{|p(x)|}, \quad f(\lambda, -\infty) \sim -a(\lambda)h^{-2} \int_{-\infty}^{x_0} \frac{dx}{|p(x)|}$$

et en rappelant (IV.42) :  $a(\lambda) = \frac{h}{2} W(\psi_-, \psi_+)$ , nous obtenons l'identité :

$$R(\lambda) = (2h)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{|p(x)|} - \dot{a}(\lambda)/a(\lambda)$$

$$\Rightarrow R(\lambda) = h^{-1} T(\lambda) - (\log a(\lambda))' \quad (V.13)$$

puis en intégrant :

$$\log \Delta(\lambda) = - \int_0^\lambda R(\lambda') d\lambda' = - h^{-1} \int_0^\lambda T(\lambda') d\lambda' + \log a(\lambda) - \log a(0) \quad (V.14)$$

Faisant  $\lambda \rightarrow -\infty$  en nous rappelant que  $a(\lambda) \rightarrow 1$ , nous obtenons :

$$\log a(0) = \int_{-\infty}^0 [h^{-1} T(\lambda) - R(\lambda)] d\lambda$$

et il en résulte les formules (V.9-10) si nous notons que :

$$\int_0^\lambda T(\lambda') d\lambda' = - \int_{-\infty}^{\infty} (\sqrt{V-\lambda} - \sqrt{V}) dx = \int_{-\infty}^{\infty} -(|p| - \sqrt{V}) dx \quad \text{CQFD.}$$

Nous soulignons que (V.14) est une formule exacte en  $\lambda$  bien que sa preuve fasse appel à l'approximation BKW pour  $|x| \rightarrow \infty$ . Cependant la principale utilité de cette formule est de fournir, en conjonction avec (IV.43), le développement semi-classique de  $\log \Delta(\lambda)$  :

$$\log \Delta(\lambda) \sim \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (p - \sqrt{V}) dx - \log a(0) + i \sum_{n=1}^{\infty} \hbar^{2n-1} \int_{-\infty}^{\infty} u_{2n} dx \quad (V.15)$$

avec  $\text{Arg } p(x) = -\pi/2$  pour  $x \in \mathbb{R}$  ; ce développement (réel) vaut pour  $\lambda < 0$  fixé,  $\hbar \rightarrow 0$  ou bien  $\hbar$  fixé,  $\lambda \rightarrow -\infty$  (en fait il s'étend à  $|\lambda| \rightarrow \infty$ ,  $\delta < \text{Arg } \lambda < 2\pi - \delta$ ). On remarquera la grande parenté entre ce développement de  $\log \Delta$  pour  $\lambda < 0$  et le développement de la règle de Bohr-Sommerfeld (IV.55) pour  $\lambda > 0$ .

## 2. Potentiels homogènes

Nous étudions plus en détail le cas  $V = x^{2M}$  ( $M \in \mathbb{N}$ ) où la relative simplicité des calculs permet de mieux comprendre la nature des développements BKW ; nous

nous concentrerons sur le cas  $M=2$  dans le § suivant.

- le cas  $M=1$  (oscillateur harmonique) : est un peu spécial en raison de la régularisation supplémentaire requise pour  $\Delta(\lambda)$ . Montrer (en exercice) que, faisant  $h=1$  :

$$\log \Delta_{\text{reg}}(\lambda) = \log a(\lambda) + \frac{1}{2} \lambda \log |\lambda| + (\log 2\gamma-1) \frac{\lambda}{2} - \frac{\log 2}{2}$$

Déduire de (V.5) que :

$$\log a(\lambda) = - \log \Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}\right) - \frac{\lambda}{2} (\log \left|\frac{\lambda}{2}\right| - 1) + \frac{\log 2\pi}{2}$$

La comparaison entre la formule de Stirling pour  $\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}\right)$  ( $\lambda \rightarrow -\infty$ ) et le développement (IV.43) impliquent :

$$i \int_{-\infty}^{\infty} u_{2n} dx = |\lambda|^{1-2n} (2^{2n-1}-1) B_{2n}/2n(2n-1) \quad (\text{V.16})$$

où  $B_{2n}$  sont les nombres de Bernoulli. Vérifier le calcul (II.44).

- dans le cas général : l'homogénéité du potentiel  $x^{2M}$  a les conséquences suivantes :

-  $u_{2n}$  est combinaison linéaire de monômes  $x^{2(kM-n)} p^{1-2(n+k)}$  ( $k \geq \frac{n}{M}$ )

-  $i \int_{-\infty}^{\infty} u_{2n} dx = b'_n |\lambda|^{-i_n}$  ( $n \geq 1, \lambda < 0$ ), où les  $b'_n$  sont des nombres réels (des nombres de Bernoulli généralisés, d'après (V.16)), et  $i_n = \left(\frac{M+1}{M}\right) (2n-1)$ .

- dans la règle de Bohr-Sommerfeld (IV.55) pour  $\lambda > 0$  :

$$- \int_{\gamma} u_{2n} dx = - 2 \sin \pi i_n b'_n \lambda^{-i_n} \quad (n \geq 1) \quad (\text{V.17})$$

En termes du nouveau paramètre  $\sigma = - \int_{\gamma} u_0 dx = \text{Cte } \lambda^{-\frac{M+1}{2M}}$  (la variable d'action du problème classique), (V.17) s'écrit :

$$- \int_{\gamma} u_{2n} dx = b_n \sigma^{1-2n}$$

et la règle de Bohr-Sommerfeld s'écrit :

$$\sum_0^{\infty} b_n (\hbar/\sigma)^{2n-1} = 2\pi(k + \frac{1}{2}) \quad (V.18)$$

en laissant voir que le paramètre asymptotique du problème est  $\frac{\hbar}{\sigma} \rightarrow \infty$ , ou encore  $k \rightarrow \infty$ . Pour  $M=1$ , (V.17) montre que tous les  $b_n$  avec  $n \geq 1$  sont nuls (les  $i_n$  sont entiers).

- quelques résultats numériques exacts peuvent être obtenus pour la fonction  $\zeta(s)$ . Deux exemples simples ( $\hbar=1$ ) (cf. articles de Voros) :

- la formule (V.10) devient :

$$\log a(0) = \int_{-\infty}^0 \left[ \frac{-1/2}{2M} \Gamma\left(\frac{1}{2M}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2M}\right) (-\lambda)^{-i_0-1} - R(\lambda) \right] d\lambda$$

et on identifie le nombre de droite comme étant  $-\zeta'(0)$  grâce aux relations (V.6-8). Mais par ailleurs les solutions  $\psi_{\pm}$  d'énergie nulle sont explicitement connues en termes de fonctions de Bessel :

$$\psi_{-}(x) = \left( \frac{2x}{(M+1)\pi} \right)^{1/2} K_{(2M+2)^{-1}} \left( \frac{x^{M+1}}{M+1} \right), \quad \psi_{+}(x) = \psi_{-}(-x) \quad (V.19)$$

On trouve donc dans les tables la valeur  $a(0) = \frac{W(\psi_{-}, \psi_{+})}{2} = \left( \sin \frac{\pi}{2M+2} \right)^{-1}$

$$\Rightarrow \zeta'(0) = \log \sin \frac{\pi}{2M+2} \quad (V.20)$$

Exactement comme pour la fonction zeta de Riemann (correspondant au spectre des entiers),  $e^{-\zeta'(0)}$  en termes des valeurs propres n'est autre que la constante dans la formule de Stirling :

$$e^{-\zeta'(0)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \prod_{k=0}^{n-1} \lambda_k \cdot \lambda_n^{1/2} \left( \frac{e^{4/3}}{\lambda_n} \right)^{(n + \frac{1}{2})} \right) \quad (V.21)$$

- en substituant (V.19) dans la formule (V.11) avec  $\lambda = 0$ , on peut aussi calculer explicitement (posant  $\mu = (2M+2)^{-1}$ ) :

$$R(0) = \text{Tr } \hat{H}^{-1} = \zeta(1) = \frac{\text{tg } 2\pi\mu \cos \pi\mu}{2\sqrt{\pi}} (2\mu)^{4\mu} \frac{\Gamma(\mu) \Gamma(2\mu) \Gamma(3\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} + 2\mu)} \quad (\text{V.22})$$

### 3. L'oscillateur quartique

Nous considérons maintenant un problème différent, mais d'une grande importance pratique, à propos de la série de Bohr-Sommerfeld (V.18) : converge-t-elle, et sinon quelle valeur a-t-elle pour l'estimation numérique des valeurs propres ? La discussion du cas homogène quartique  $V = x^4$  est particulièrement simple, mais doit pouvoir se généraliser. Nous ne donnons ici que les résultats et les raisonnements principaux et nous renvoyons aux articles de Balian-Parisi-Voros pour tous détails (également article de Voros en préparation pour 1981).

Nous partons d'une estimation empirique basée sur le calcul explicite d'un grand nombre ( $\approx 60$ ) de termes de (V.18) pour  $V = x^4$  :

$$|b_n| \sim (2n-2)! 2^n c. \quad (\text{V.23})$$

Ceci suggère que (V.18) a un rayon de convergence nul et nous oblige à chercher du côté des méthodes de resommation de séries divergentes.

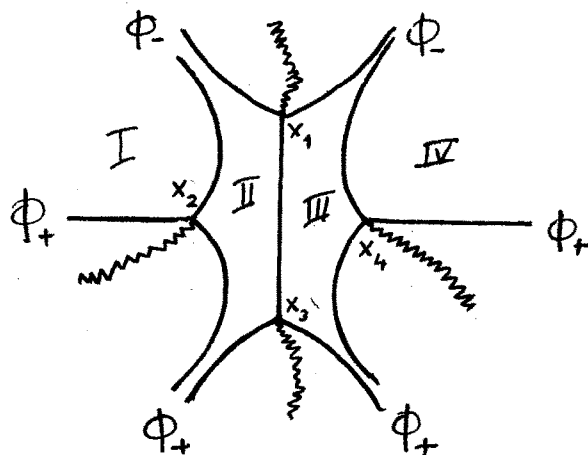
- raccordement avec 4 points tournants : nous avons vu au chapitre précédent que la formule (V.18) provient de la méthode de raccordement prenant en compte les deux points tournants réels de  $V-\lambda$ ,  $\lambda > 0$ . Mais le problème avec  $V = x^4$  a quatre points tournants  $x_j = e^{ij\pi/2} \lambda^{1/4}$  ( $j = 1,2,3,4$ ). Nous allons élucider le rôle joué par les deux points tournants complexes, jusqu'ici négligés ; nous verrons plus tard que ces points sont en particulier responsables du comportement asymptotique (V.23) des coefficients  $b_n$ . Pour comprendre la situation, il est indispensable :

- 1) d'utiliser la méthode de raccordement de Knoll-Schaeffer ;
- 2) d'explorer les valeurs complexes du paramètre spectral  $\lambda$ .

La méthode de Knoll-Schaeffer (voir leur article, et la fin du chapitre précédent) consiste à tracer toutes les lignes de Stokes du problème (courbes vérifiant  $\text{Re} \int_{x_j}^x (\lambda - V(x'))^{1/2} dx' = 0$ ,  $x_j =$  point tournant) et à attribuer aux coefficients  $b_{\pm}$

de la décomposition  $\psi = b_+ \phi_+ + b_- \phi_-$  (éq. (IV.15)) des valeurs constantes dans chaque composante connexe du plan complexe des  $x$  privé des lignes de Stokes ; on raccorde les coefficients entre deux régions adjacentes par les formules (IV.60) si l'on tient compte de tous les termes en puissances de  $\hbar$ , ou (IV.61) si l'on ne garde que le terme principal ; nous allons montrer le détail du calcul pour  $V = x^4$  avec l'option (IV.61). Nous prenons les déterminations de  $p(x) = (\lambda - x^4)^{1/2}$  et  $p^{-1/2}$  qui sont positives sur  $]-\lambda^{1/4}, +\lambda^{1/4}[$ .

La figure ci-contre montre le détail des lignes de Stokes ; nous avons placé des coupures (lignes en zigzag) à des endroits qui s'avèreront peu gênants par la suite. Sur chaque ligne de Stokes partant à l'infini nous marquons celle des expressions  $\phi_{\pm} = p^{-1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \int p dx$  qui est dominante à l'infini dans la direction considérée.



Soit  $\psi$  la solution de  $\psi'' = (x^4 - \lambda)\psi$  récessive à  $+\infty$ , par exemple :

$$\psi \sim e^{-i\pi/4} \phi_{-,x_4} \quad (x \rightarrow -\infty) \quad (V.24)$$

(définition cohérente avec les formules (IV.63) et suivantes qui ne prenaient en compte que les 2 points tournants réels ; nous reprenons aussi les notations (IV.56-57)).

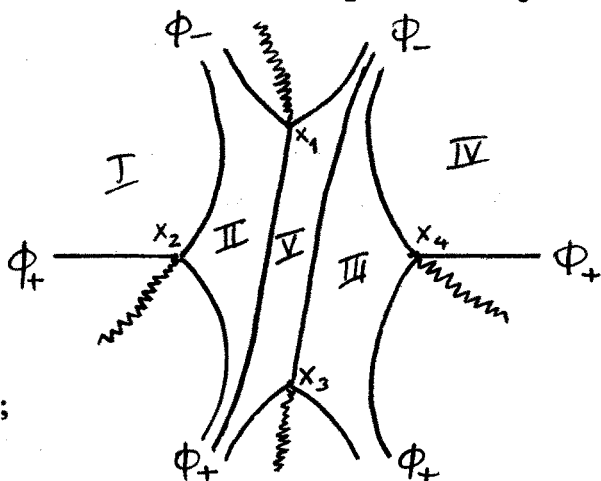
Pour les besoins du problème aux valeurs propres il nous suffira de suivre la solution  $\psi$  dans les régions marquées I à IV sur la figure. La solution  $\psi$ , récessive pour  $x \rightarrow +\infty$ , admet nécessairement le comportement (V.24) dans toute la région IV :

$$\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}_{IV} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\pi/4}$$

Pour passer de IV à III nous tournons autour du point  $x_4$  dans le sens trigonométrique dans une région où  $\phi_-$  domine, donc :

$$\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}_{IV} = F_{III,IV} \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}_{III}, \quad F_{III,IV} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (V.25)$$

Mais si nous cherchons à passer de III en II, nous obtenons un résultat différent suivant que nous appliquons (IV.62) autour du point tournant  $x_1$  ou bien  $x_3$  : la règle de Knoll-Schaeffer n'est pas cohérente lorsqu'une ligne de Stokes relie deux points tournants. Pour lever l'ambiguïté, nous devons attribuer à  $\lambda$  une petite partie imaginaire. Pour  $\lambda \rightarrow \lambda + i0$  le diagramme des lignes de Stokes est modifié suivant le schéma ci-contre : une nouvelle région (V) apparaît. Maintenant :  $F_{V,III} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  également, après avoir ramené l'origine des intégrations en  $x_3$ ; puis on passe de V à II en tournant autour de  $x_1$ , etc ... La matrice de raccordement dont nous avons besoin est (comparer à (IV.64)):



$$F_{I,IV} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{x_2} & 0 \\ x_1 & e^{x_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{x_3} & 0 \\ 0 & e^{x_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{x_4} & 0 \\ 0 & e^{x_4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (V.26)$$

La condition aux valeurs propres est que le coefficient du terme dominant de pour  $x \rightarrow -\infty$ , à savoir  $b_+$ , s'annule :

$$(1 \ 0) F_{I,IV} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\pi/4} = 0 \quad (V.27)$$

ce qui donne :

$$e^{i\pi/4} \left\{ e^{x_2} + e^{x_1} e^{x_1} + e^{x_1} e^{x_1} e^{x_4} + e^{x_2} e^{x_4} + e^{x_4} \right\} = 0 \quad (V.28)$$

Par définition, la variable action classique est :

$$\sigma = 2 \int_{x_2}^{x_4} p \, dx = 2\hbar i^{-1} \log e_2^4$$

et les autres intégrales s'évaluent aussi explicitement :

$$\int_{x_j}^{x_k} p \, dx = \frac{x_k - x_j}{x_4 - x_2} \frac{\sigma}{2} \quad (vj,k)$$



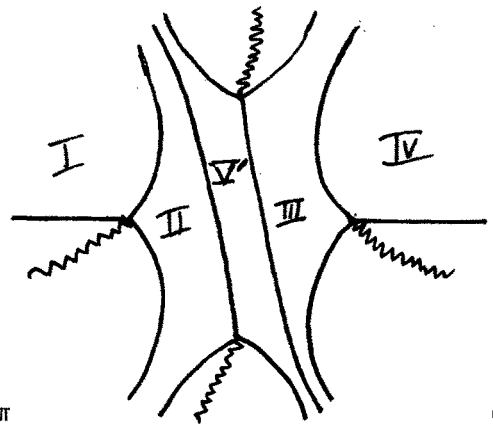
La condition (V.28) devient (faisant  $h=1$ ) :

$$e^{i\sigma/2} + e^{-i\sigma/2} + 2e^{-\sigma/2} + e^{i\sigma/2-\sigma} = 0 \quad (V.29)$$

Les deux derniers termes représentent la contribution des points tournants complexes, précédemment négligés ; ces termes sont exponentiellement petits (limite classique :  $\sigma \rightarrow +\infty$ ). Plus précisément, la  $k^{\text{ème}}$  solution  $\sigma_k$  de (V.29) vérifie :

$$\sigma_k - 2i \log(1-(-1)^k i e^{-\sigma_k/2}) = (2k+1)\pi \quad (V.30)$$

Toutefois si nous attribuons à  $\lambda$  une petite partie imaginaire négative ( $\lambda \rightarrow \lambda - i0$ ) le diagramme des lignes de Stokes diffère du précédent (schéma ci-contre) et nous obtenons au lieu de (V.30) la formule conjuguée :



$$\sigma_k + 2i \log(1+(-1)^k i e^{-\sigma_k/2}) = (2k+1)\pi \quad (V.31)$$

Les deux formules coïncident cependant au premier ordre en  $e^{-\sigma/2}$  :

$$\sigma_k = (2k+1)\pi + (-1)^k e^{-\sigma_k/2} + O(e^{-\sigma_k}) \quad (V.32)$$

(et la valeur propre  $\lambda_k$  est liée à  $\sigma_k$  par la correspondance classique énergie-action :

$$\sigma_k = 2 \int_{x_2}^{x_4} (\lambda_k - x^4)^{1/2} dx = \frac{\Gamma(1/4)^2}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \lambda_k^{3/4} \quad (V.33)$$

- interprétation : les calculs précédents paraissent au premier abord purement formels (inclusion de termes exponentiellement petits alors qu'on a négligé les corrections en puissances) et d'ailleurs incohérents puisqu'ils engendrent des termes formellement non réels dans le spectre, lesquels termes dépendent en outre du mode de calcul choisi : comparer (V.30) et (V.31). Mais la présence de ces termes s'impose numériquement (articles de Balian-Parisi-Voros) : nous sommes donc conduits à leur chercher une interprétation.

L'idée la plus naturelle, empruntée au livre de Dingle, consiste à regarder la

transformée de Borel du développement semi-classique (V.18), définie comme :

$$b(s) = \sum_0^{\infty} b_n s^{2n}/(2n-2)! \quad (V.34)$$

et a chercher une représentation de Laplace pour le membre de gauche  $\bar{F}(\sigma)$  de la règle de Bohr-Sommerfeld exacte :

$$\bar{F}(\sigma_k) = (2k+1)\pi, \quad \bar{F}(\sigma) = \int_0^{\theta\infty} s^{-2} b(s) e^{-\sigma s} ds$$

avec  $\theta = e^{-i \text{Arg } \sigma}$  (ligne de plus grande pente de  $|e^{-\sigma s}|$ ). Comme dans la méthode du col (Appendice 4), si une telle représentation est valide, alors toute contribution exponentiellement petite  $e^{-a\sigma}$  à  $\bar{F}(\sigma)$  correspond à une singularité (de ce fait calculable) de  $b(s)$  en  $s = a$  ( $a \in \mathbb{C}$ ,  $\text{Re}(a\sigma) > 0$ ). En donnant à  $\text{Arg } \sigma$ , c'est-à-dire à  $\text{Arg } \lambda$ , toutes les valeurs, nous décrivons par les formules de raccordement les singularités analytiques de la fonction  $b(s)$ . Les discontinuités dans les termes exponentiellement petits (phénomène de Stokes) apparaissent précisément lorsque le chemin d'intégration rencontre une singularité (ex.  $\text{Arg } \lambda = 0$ ). Si l'on inclut les corrections en puissances données par (IV.60), le formalisme donne une description parfaitement cohérente de la structure analytique globale de  $b(s)$ .

Dans le problème qui nous concerne, le développement en puissances de  $e^{-\sigma/2}$  de la règle de Bohr-Sommerfeld, obtenu à partir de (V.29) pour  $(\sigma+i0)$ , est :

$$\left. \begin{aligned} \bar{F}(\sigma) &= \sigma+i(e^{i\sigma/2} - e^{-i\sigma/2})e^{-\sigma/2} - ie^{-\sigma} + 0(e^{-3\sigma/2}) \\ \text{(pour } (\sigma-i0) : \bar{F}(\sigma) &= \sigma+i(e^{i\sigma/2} - e^{-i\sigma/2})e^{-\sigma/2} + ie^{-\sigma} + 0(e^{-3\sigma/2}) \end{aligned} \right\} \quad (V.35)$$

Traduction :  $b(s)$  a des singularités en  $s = \frac{1}{2} \pm \frac{i}{2}$  et en  $s = 1$  (comme  $b(s)$  est paire nous obtenons les mêmes singularités aux points opposés). Les 4 singularités les plus proches de  $s = 0$  :  $s = \pm \frac{1}{2} \pm \frac{i}{2}$  engendrent la formule asymptotique (V.23) pour  $b_n$ ,  $n \rightarrow \infty$  (nous avons également pu mettre en évidence les singularités en  $s = \pm 1$  par des calculs numériques plus délicats). Le terme principal de chaque singularité, tel qu'il ressort de (V.35), est un pôle simple, mais les corrections en puissances de  $\sigma^{-1}$  superposent au même endroit des ramifications logarithmiques.

- Exemple d'application : les singularités que nous venons de calculer engen-

drent aussi le comportement asymptotique pour  $s \rightarrow -\infty$  de la fonction zeta de l'oscillateur quartique.

Pour conclure, nous pensons que ces considérations devraient au moins s'étendre, d'une façon à déterminer, à tous les potentiels polynômiaux à une dimension.

## Appendice

### 1. Séries asymptotiques (cf livre d'Oliver chapitre 1).

Soit  $f(z)$  une fonction définie dans un secteur  $S : |z| < R, \theta_1 \leq \text{Arg } z \leq \theta_2$ , et  $\sum_0^{\infty} a_n z^{-n}$  une série formelle. On dit que cette série est le développement asymptotique de  $f$  dans  $S$  (notation :  $f(z) \sim \sum a_n z^{-n}$ ) si :

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad |f(z) - \sum_0^n a_k z^{-k}| \leq C_{n+1} |z|^{-n-1}, \quad z \rightarrow \infty, z \in S \quad (\text{A.1})$$

$$\Leftrightarrow \forall n \in \mathbb{N} : \lim_{\substack{z \rightarrow \infty \\ z \in S}} z^n (f(z) - \sum_0^{n-1} a_k z^{-k}) = a_n \quad (\text{A.2})$$

(A.2) implique l'unicité du développement asymptotique dans un secteur, mais inversement une série formelle quelconque est asymptotique à beaucoup de fonctions. Ex. :  $0 \sim \sum 0 \cdot z^{-n}$  mais aussi  $e^{-z} \sim \sum 0 \cdot z^{-n}$  ( $z \rightarrow \infty, |\text{Arg } z| < \frac{\pi}{2}$ ).

Si la série  $\sum a_n z^{-n}$  converge pour  $z_0$ , sa somme est une fonction  $f(z)$  analytique pour  $|z| > |z_0|$ , et trivialement  $f(z) \sim \sum a_n z^{-n}, z \rightarrow \infty$  ( $\forall \text{Arg } z$ ). Mais le cas intéressant est celui où  $\sum a_n z^{-n}$  ne converge pour aucun  $z$  fini : la série peut néanmoins fournir des informations qualitatives ou numériques sur la fonction  $f(z)$  étudiée.

Extensions évidentes mais utiles : développements en puissances descendantes non entières de  $z$ , développements pour  $z \rightarrow z_0$ , etc ...

On montre que les opérations habituellement permises sur les séries entières s'étendent aux séries asymptotiques divergentes : somme, produit, quotient, inversion, substitution, intégration terme à terme (pas différentiation en général !).

### 2. Table de quelques intégrales

$$\int_0^{\infty} e^{-t^{M/M}} t^n dt = M^{\frac{n+1}{M} - 1} \Gamma\left(\frac{n+1}{M}\right) \quad (\text{A.3})$$

(prendre  $t^M$  comme variable d'intégration ; on suppose connue la fonction  $\Gamma$  d'Euler).

Cas particulier très important :  $M=2$ , d'où l'on tire pour  $n \in \mathbb{N}$  :

$$\left. \begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/2} t^n dt &= 0 \quad \text{si } n \text{ impair} \\ &= 2^{m+1/2} \Gamma(m+1/2) \quad \text{si } n = 2m \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{it^M/M} t^n dt &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{e^{i\varepsilon}} e^{it^M/M} t^n dt \quad (\text{par définition}) \\ &= e^{\left(\frac{n+1}{M}\right) \frac{i\pi}{2}} M^{\frac{n+1}{M}-1} \Gamma\left(\frac{n+1}{M}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Pour  $M=2$  on en déduit les formules à la Fresnel :

$$\left. \begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm it^2/2} t^n dt &= 0 \quad \text{si } n \text{ impair} \\ &= e^{\pm(2m+1) \frac{i\pi}{4}} 2^{m+1/2} \Gamma(m+1/2) \quad \text{si } n=2m \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.6})$$

### 3. Méthode de la phase stationnaire

Il s'agit d'obtenir le développement asymptotique pour  $x \rightarrow +\infty$  d'une intégrale paramétrique de la forme :

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(t) e^{ix\phi(t)} dt \quad a, \phi \in C^\infty \text{ (réelles)} \quad (\text{A.7})$$

avec les hypothèses simplificatrices :  $a \in L^1(\mathbb{R})$ ,  $|\phi'(t)| > c > 0$  quand  $|t| \rightarrow \infty$ ,  $t \in \text{Supp } a$ , et tous les zéros de  $\phi'$  dans  $\text{Supp } a$  (en nombre fini) sont simples ; ces zéros sont appelés points critiques de  $\phi$ .

En fait les termes du développement de  $F$  dépendent (linéairement) de  $a(t)$  seulement par son germe autour des points critiques de  $\phi$ , d'où le nom de la méthode. Il est commode de décomposer le calcul en plusieurs étapes :

1) si  $a \in \mathcal{C}(\mathbb{R})$ ,  $\text{Supp } a$  connexe et  $\phi'$  ne s'annule pas dans  $\text{Supp } a$  :

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_{\text{Supp } \hat{a}} \hat{a}(\phi) e^{ix\phi} d\phi, \quad \hat{a}(\phi) = (a \circ t)(\phi) dt/d\phi \\ &= - \int_{\text{Supp } \tilde{a}} \tilde{a}'(\phi) \frac{e^{ix\phi}}{ix} = \int_{\text{Supp } \tilde{a}} \tilde{a}''(\phi) \frac{e^{ix\phi}}{(ix)^2} = \dots = o(x^{-\infty}) \end{aligned}$$

par intégrations par parties successives. Donc  $F(x) \sim 0$ .

2) si  $a \in C^\infty \cap L^1$  et  $\phi = \frac{\phi''}{2} t^2$  :

$$F(x) \sim \sum_0^\infty \frac{a^{(2n)}(0)}{(2n)!} 2^{n+1/2} \Gamma(n+1/2) \left(\frac{i}{\phi''}\right)^{1/2} i^n \phi''^{-n} x^{-n-1/2} \quad (\text{A.8})$$

avec la détermination suivante :

$$\text{Arg} \left(\frac{i}{\phi''}\right)^{1/2} = \pi/4 \text{ si } \phi'' > 0, \quad -\pi/4 \text{ si } \phi'' < 0$$

(ce point est capital).

Preuve par récurrence avec intégration par parties :

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} a(t) e^{ix\phi''t^2/2} dt + \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{a(t)-a(0)}{t} \right] e^{ix\phi''t^2/2} dt \\ &= a(0) 2^{1/2} \Gamma(1/2) \left(\frac{i}{\phi''}\right)^{1/2} x^{-1/2} + \frac{i}{x\phi''} \int_{-\infty}^{\infty} a_2(t) e^{ix\phi''t^2/2} dt \end{aligned}$$

en utilisant (A.6) ; le premier terme est le début de (A.8) et le second est du même type que  $F(x)$  avec  $a_2(t) = \left(\frac{a(t)-a(0)}{t}\right)'$  ; il suffit donc d'itérer le processus.

3) cas général : on décompose (par partition de l'unité)  $\text{Supp } a$  en parties connexes assez petites pour que dans chacune d'elles :

- soit 1) s'applique ( $\Rightarrow$  contribution asymptotique nulle)

- soit il y ait un seul point critique de  $\phi$ , par ex.  $t = 0$ , et un homéomorphisme local  $t \leftrightarrow u$  tel que  $\phi(t) \equiv \phi(0) + \frac{\phi''(0)}{2} u^2$  : ce changement de variable ramène alors au cas 2), avec en plus un facteur constant  $e^{ix\phi(0)}$ .

La méthode de la phase stationnaire est très importante par ses multiples applications, pour lesquelles deux points sont à retenir :

a) la forme du terme dominant pour  $x \rightarrow +\infty$  ( $K = \{\text{points critiques de } \phi\}$ )

$$F(x) \sim \sum_{t_j \in K} e^{ix\phi(t_j)} a(t_j) \left(\frac{2\pi i}{\phi''(t_j)}\right)^{1/2} x^{-1/2} + o(x^{-3/2}) \quad (\text{A.9})$$

b) le mode pratique de calcul des termes correctifs à (A.9) : pour chaque point critique  $t_j$  on décompose :

$$\phi(t) = \phi(t_j) + \frac{\phi''(t_j)}{2} (t-t_j)^2 + \phi_3(t-t_j)$$

puis on prend  $u = \sqrt{x} (t-t_j)$  comme variable d'intégration. Alors :

$$F(x) = e^{ix\phi(t_j)} x^{-1/2} \int e^{i\phi''(t_j)u^2/2} \left\{ a\left(t_j + \frac{u}{\sqrt{x}}\right) \exp\left(ix\phi_3\left(\frac{u}{\sqrt{x}}\right)\right) \right\} du .$$

Enfin on développe tout ce qui est entre accolades en puissances de  $x^{-1/2}$  ; les coefficients sont des polynômes en  $u$ , et on les intègre terme à terme en utilisant (A.6). On obtient ainsi des formules explicites, mais très compliquées, à tout ordre fini en  $x^{-1/2}$  (remarque : seules les puissances impaires de  $x^{-1/2}$  apparaissent). cf. par ex. Dingle, chapitre V §.3.

#### 4. Méthode du col

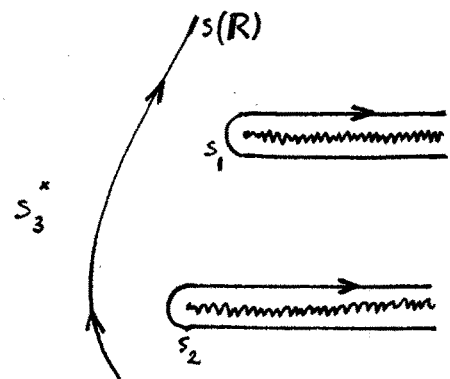
C'est une variante de la méthode précédente pour des fonctions analytiques, et susceptible de fournir des résultats plus précis que simplement asymptotiques. Nous la décrivons de manière purement formelle (cf. articles de Balian-Parisi-Voros, Malgrange, Pham).

Reprenons l'intégrale (A.7) avec maintenant  $a$  et  $\phi$  analytiques (entières), et fixons  $-i\phi(t) = s(t)$  comme nouvelle variable d'intégration :

$$F(x) = \int_{s(\mathbb{R})} e^{-xs} \rho(s) ds \quad , \quad \rho(s) = dt/ds \tag{A.10}$$

La fonction  $\rho$  se ramifie aux valeurs critiques  $s_j = s(t_j)$  où maintenant  $t_j$  parcourt les points critiques complexes de  $\phi$ .

Le chemin d'intégration  $s(\mathbb{R})$  doit être représenté sur la surface de Riemann  $\Sigma$  de  $\frac{dt}{ds}$ . On le pousse alors sur  $\Sigma$  dans la direction de plus grande pente descendante de  $|e^{-xs}| = e^{-x \operatorname{Re} s}$ , et on obtient une décomposition de  $F$  en transformées de Laplace (figure) :



$$F(x) = \sum_{s_j} n_j \int_{s_j}^{+\infty} e^{-xs} \Delta_{j\rho}(s) ds \quad (\text{A.11})$$

où  $\Delta_{j\rho}$  est la discontinuité de  $\rho$  à travers la coupure horizontale  $[s_j, +\infty[$  et les  $n_j \in \mathbb{Z}$  sont des multiplicateurs topologiques associés au chemin initial  $s(\mathbb{R})$ . Conditions de validité de (A.11) : pas de contributions de l'infini au cours de la déformation depuis (A.10), et tous les  $\text{Im } s_j$  distincts deux à deux.

Considérons le développement de Puiseux de  $\Delta_{j\rho}$  autour de  $s_j$  :

$$\Delta_{j\rho}(s) = \sum_{k=0}^{\infty} \rho_{k-1/2}^{(j)} (s-s_j)^{k-1/2} / \Gamma(k+1/2) \quad (\text{A.12})$$

Cette série converge dans tout disque de centre  $s_j$  ne contenant aucune autre valeur critique  $s_j$ , et se calcule explicitement connaissant  $\phi$  (cf. livre de Valiron, chapitre 1-2). Si  $\rho$  est à croissance polynômiale pour  $\text{Re } s > 0$  on peut substituer la série (A.12) pour  $\Delta_{j\rho}$  et intégrer terme à terme pour obtenir un développement divergent mais asymptotique pour :

$$e^{xs_j} \int_{s_j}^{+\infty} e^{-xs} \Delta_{j\rho}(s) ds \sim \sum_{k=0}^{\infty} \rho_{k-1/2}^{(j)} x^{-k-1/2} \quad (x \rightarrow +\infty) \quad (\text{A.13})$$

Donc formellement :

$$F(x) \sim \sum_{s_j} n_j e^{-xs_j} \left[ \sum_{k=0}^{\infty} \rho_{k-1/2}^{(j)} x^{-k-1/2} \right] \quad (\text{A.14})$$

mais cette expression n'est pas asymptotiquement définie car (en général) elle contient des préfacteurs (relativement) exponentiellement petits. L'interprétation correcte est la suivante (cf. livre de Dingle, chapitre 21-24) :  $\Delta_{j\rho}(s)$  est définie par (A.12) comme la transformée de Borel de la série divergente (A.13),  $\Delta_{j\rho}(s)$  se prolonge analytiquement sur la coupure  $[s_j, +\infty[$ , l'intégrale  $\int_{s_j}^{\infty} e^{-xs} \Delta_{j\rho}(s) ds$  converge

et est appelée la somme de Borel de la série  $\sum_{k=0}^{\infty} \rho_{k-1/2}^{(j)} x^{-k-1/2}$  ; par (A.11),  $F(x)$  est

une combinaison des sommes de Borel des contributions asymptotiques de chaque valeur critique de  $s(t)$ .



Si maintenant nous déformons continûment (par un paramètre supplémentaire) la situation (A.10),  $F(x)$  variera continûment, mais la décomposition (A.11) changera de manière discontinue chaque fois que deux parties imaginaires de valeurs critiques se croiseront (phénomène de Stokes) : plus précisément il y a un saut du multiplicateur  $n_j$  associé à la valeur critique la plus à droite, c'est-à-dire associé à un terme exponentiellement petit dans (A.14).

### 5. Fonction d'Airy

C'est la solution de l'équation de Schrödinger (IV.48) :  $\psi'' = x\psi$  spécifiée par sa récessivité pour  $x \rightarrow +\infty$  :

$$\text{Ai}(y) \sim (2\sqrt{\pi})^{-1} |p(y)|^{-1/2} \exp - \int_0^y |p| dx, \quad p(x) = (-x)^{1/2} \quad (\text{A.15})$$

ce qui implique (cf. (IV.49-50)) :

$$\text{Ai}(y) \sim \pi^{-1/2} |y|^{-1/4} \text{Re} \left[ e^{-i\pi/4} \exp \frac{2i}{3} |y|^{3/2} \right], \quad y \rightarrow -\infty \quad (\text{A.16})$$

Donc  $\text{Ai}(x) \in \mathcal{Y}'(\mathbb{R})$  ; sa transformée de Fourier existe et est solution de  $\tilde{\text{Ai}}(\xi)' = i\xi^2 \tilde{\text{Ai}}(\xi)$  d'où la représentation intégrale :

$$\text{Ai}(y) = C \int_{-\infty}^{\infty} \exp i\left(\frac{\xi^3}{3} + \xi y\right) d\xi \quad (\text{A.17})$$

(C à déterminer), que nous mettons sous la forme plus maniable :

$$F(x) = x^{-1/3} \text{Ai}(x^{2/3} e^{i\theta}) = C \int_{-\infty}^{\infty} \exp ix\left(\frac{t^3}{3} + e^{i\theta}t\right) dt \quad (x > 0, \theta \in \mathbb{R}) \quad (\text{A.18})$$

- Propriétés dans le réel : Si  $\theta = \pi$  l'intégrale (A.18) est justiciable de la méthode de la phase stationnaire avec  $\phi(t) = \frac{t^3}{3} - t$ , points critiques  $t_j = \pm 1$  ; (A.9) donne :

$$F(x) \sim 2C \left(\frac{\pi}{x}\right)^{1/2} \text{Re} \left( e^{-i\pi/4} e^{2ix/3} \right) \quad (x \rightarrow +\infty)$$

et par comparaison avec (A.16) :

$$C = (2\pi)^{-1} \quad (\text{A.19})$$

Les termes correctifs à (A.16) se calculent comme il a été dit au §.3b). La contribution de  $t_j = + 1$  vaut (l'autre sera complexe conjuguée) :

$$F(x) = \frac{e^{-\frac{2}{3}ix}}{2\pi\sqrt{2x}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{iu^2}{2}} \left\{ \exp \frac{iu^3}{6\sqrt{2x}} \right\} du$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{iu^2}{2}} \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{iu^3}{6\sqrt{2x}} \right)^n \right) du \sim \sum_{(n=2m)} \frac{(-1)^m}{(2m)!(72x)^m} i^{3m} e^{i\pi/4} 2^{6m+1/2} \Gamma(6m+1/2)$$

Finalement :

$$Ai(-y) \sim \frac{y^{-1/4}}{2\sqrt{\pi}} \left[ e^{-i\pi/4} e^{\frac{2i}{3}y^{3/2}} \left( \sum_0^{\infty} (-i)^n \gamma_n y^{-3n/2} \right) + e^{i\pi/4} e^{\frac{2i}{3}y^{3/2}} \left( \sum_0^{\infty} i^n \gamma_n y^{-3n/2} \right) \right]$$

(y → + ∞) (A.20)

avec  $\gamma_n = \frac{(6n)!}{(2n)!(3n)!24^{2n}}$ .

En appliquant la méthode du col (§.4) à (A.18) avec  $\theta = 0$ , on trouve que seul le point critique  $t = + i$  (valeur critique  $s = \frac{2}{3}$ ) contribue à la décomposition de Laplace (A.11). Le calcul des corrections, analogue au précédent, donne :

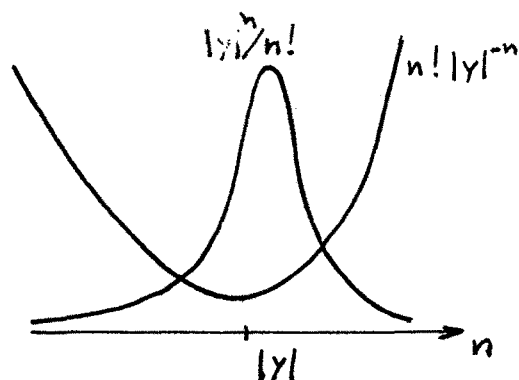
$$Ai(y) \sim \frac{y^{-1/4}}{2\sqrt{\pi}} e^{-\frac{2}{3}y^{3/2}} \left( \sum_0^{\infty} (-1)^n \gamma_n y^{-3n/2} \right) \quad y \rightarrow + \infty \quad (A.22)$$

Les séries (A.20-22) sont divergentes en raison de la croissance de  $\gamma_k \sim k! (3/4)^k (2k\pi)^{-1}$  pour  $k \rightarrow \infty$ . La fonction d'Airy est un bon terrain expérimental d'étude de telles séries.

Par ailleurs en développant (A.17) en puissances croissantes de  $y$  et en intégrant terme à terme grâce à la formule (A.5), on trouve une représentation de  $Ai(y)$  en série entière convergente pour tout  $y$  :

$$Ai(y) = \frac{3^{-2/3}}{\Gamma(2/3)} \left( 1 + \frac{1}{3!} y^3 + \frac{1.4}{6!} y^6 + \frac{1.4.7}{9!} y^9 + \dots \right) - \frac{3^{-1/3}}{\Gamma(1/3)} \left( y + \frac{2}{4!} y^4 + \frac{2.5}{7!} y^7 + \dots \right) + \frac{2.5.8}{10!} y^{10} + \dots \quad (A.23)$$

Il est édifiant de comparer le calcul numérique d'une valeur typique, par exemple  $Ai(-5) = 0.35076101 \dots$ , par les deux méthodes. La série divergente (A.20) tronquée à  $n=3$  donne 4 chiffres significatifs. Avec la série convergente (A.23) il faut environ 15 termes pour atteindre une précision comparable, et ce au prix de nombreuses compensations entre termes opposés (ce qui amplifie les erreurs d'arrondi). En revanche il n'y a pas de limite théorique à la précision dans le second cas ; mais avec la série divergente (sans méthode de resommation) on ne peut espérer mieux que le plus petit terme de la série (pour  $y = -5$  c'est autour du 15ème terme, de l'ordre de  $10^{-8}$ ).



Une autre description de la supériorité initiale de la série divergente est qu'elle est du type  $\sum n! y^{-n}$  alors que la série convergente est du type inverse  $\sum y^n/n!$

La série divergente paraît converger rapidement jusque vers  $n \approx |y|$  puis

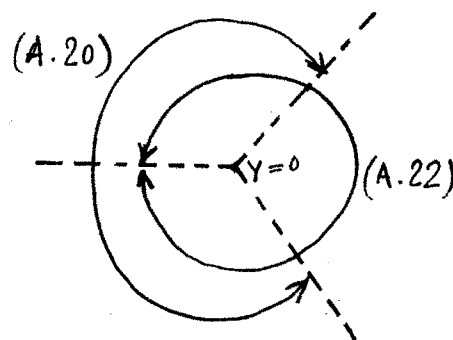
révèle sa nature divergente ; la série entière, à l'inverse, paraît d'abord diverger et n'atteint le régime convergent que beaucoup plus loin. C'est pourquoi les séries divergentes peuvent être des outils d'approximation très efficaces ; malheureusement les estimations d'erreur sont très difficiles et doivent se faire cas par cas.

- Propriétés dans le complexe : étudions la transition entre la formule à une série (A.22) et la formule à deux séries (A.20) quand  $\theta$  varie de 0 à  $\pi$ . Deux usages se font concurrence dans la littérature :

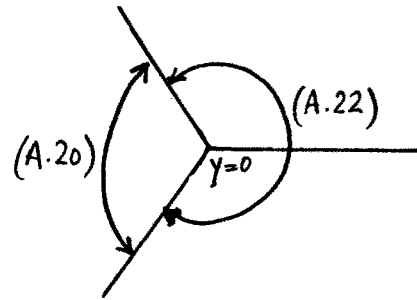
a) on prolonge en  $\theta$  le domaine de validité de chaque expression jusqu'à la première ligne principale où peut apparaître un nouveau terme dominant (équation des lignes principale :  $\text{Im} \int_0^y p dx = \text{Im}(-y)^{3/2} = 0$ ).

Les domaines de validité se chevauchent

(figure), mais il n'y a pas contradiction car la différence entre (A.20) et (A.22) est toujours sous-dominante dans chaque secteur de chevauchement. Cette méthode est donc compatible avec l'utilisation asymptotique des développements.



b) mais si l'on veut faire des calculs numériques avec ces séries, il faut être plus précis et décider si et quand on garde les contribution numériques sous-dominantes (parfois non négligeables). Quand on s'éloigne de part et d'autre d'une ligne principale où les deux séries sont comparables, la continuité numérique exige de conserver les termes sous-dominants, mais on ne peut ainsi aller jusqu'à la prochaine



ligne principale, puisque ces termes  $y$  sont différents. Un moyen terme est de placer les démarcations à mi-chemin, sur les lignes de Stokes, d'équation  $\text{Re}(-y)^{3/2} = 0$  ; c'est aussi à cet endroit (cf. figure) qu'une discontinuité dans le terme sous-dominant est comparativement la moins gênante.

Quant à la méthode du col appliquée à (A.18) pour  $\theta$  quelconque, elle favorise la convention b) puisque la représentation de Borel (A.11) passe de manière discontinue de un à deux termes précisément quand  $\theta = \text{Arg}(y)$  rencontre en croissant  $2\pi/3$  : sur la ligne de Stokes. Cependant le lien entre la resommation de Borel (procédé purement abstrait) et les approximations numériques n'est absolument pas clair.

### BIBLIOGRAPHIE

#### Livres de référence.

- E. Coddington, N. Levinson : Theory of Ordinary Differential Equations (Mc Graw Hill, 1955).
- R.B. Dingle : Asymptotic Expansions: Their Derivation and Interpretation (Acad. Press, 1973).
- J. Duistermaat : Fourier Integral Operators (Courant Institute Press, New York, 1973).
- N. Dunford, J. Schwartz : Linear Operators II (Wiley, 1963).
- N. Fröman, P.O. Fröman : The JWKB Approximation, Contributions to the Theory (North Holland, 1965).
- V. Guillemin, S. Sternberg : Geometric Asymptotics (AMS Mathematical Surveys n° 14, 1977).
- J. Heading : Introduction to Phase-Integral Methods (Methuen, 1962).
- G. Mackey : Mathematical Foundations of Quantum Mechanics (Benjamin, 1963).
- V. Maslov : Théorie des Perturbations et Méthodes Asymptotiques (Dunod 1972).

- F. Olver : Asymptotics and Special Functions (Acad. Press, 1974).
- M. Reed, B. Simon : Methods of Modern Mathematical Physics I (1972) & II (1975) (Acad. Press).
- L. Schiff : Quantum Mechanics (Mc Graw Hill, 1968).
- E. Titchmarsh : Eigenfunction Expansions I (Clarendon, 1962).
- G. Valiron : Equations Fonctionnelles (Masson, 1950).

### Articles

- R. Balian, G. Parisi, A. Voros : Quartic Oscillator, dans : Feynman Path Integrals (Springer Lecture Notes in Physics vol. 106, 1979, p. 337-359) et : Phys. Rev. Lett. 41 (1978), 1141.
- V. Bargmann : On a Hilbert Space of Analytic Functions and an Associated Integral Transform, Comm. Pure Appl. Math. 14 (1961) 187.
- M. Berry, K. Mount : Semiclassical Approximations in Wave Mechanics, Rep. Progr. Phys. 35 (1972) 315.
- J.P. Eckmann, R. Sénéor : The Maslov-WKB Method for the (an) Harmonic Oscillator, Arch. Rat. Mech. Anal. 61 (1976) 153.
- L. Hörmander : Fourier Integral Operators, I : Acta Math. 127 (1971) 79 ; II (with J. Duistermaat) : Acta Math. 128 (1972) 183.
- J. Knoll, R. Schaeffer : Semiclassical Scattering Theory with Complex Trajectories I Ann. Phys. (NY) 97 (1976) 307.
- B. Malgrange : Méthode de la Phase Stationnaire et Somme de Borel, dans Complex Analysis, Microlocal Calculus,... (Springer Lecture Notes in Physics vol. 126, 1980, p. 170-177).
- F. Olver : General Connection Formular for Liouville-Green Approximations in the Complex Plane, Phil. Trans. Roy. Soc 289 A (1978) 501.
- F. Pham : Article en préparation, (Université de Nice, 1981 ?).
- A. Voros : The Zeta Function of the Quartic Oscillator, Nucl. Phys. B 165 (1980) 209 ; article en préparation (Service de Physique Théorique, CEN Saclay, 1981).

M. André VOROS  
Service de Physique Théorique  
CEN Saclay  
91191 GIF SUR YVETTE CEDEX  
- FRANCE -

*N° D'IMPRESSION 517*  
*1er TRIMESTRE 1982*