Université de M'sila

FACULTÉ DES MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUES

Département de Mathématiques

Mémoire de Fin D'étude

Présenté pour l'obtention du diplôme de **Licence**

Domaine :Mathématiques et Informatique

Filière :Mathématiques

Spécialité :Mathématiques Appliquées

Par

abdelhafid quaddour

sujet

sur la théorie spectrale pour l'opérateur de schrödinger

Dirigé par :

Mr.Toufik HERAIZ

Promotion:2016/2017

Remerciements

Nous tenons à exprimer nos vifs remerciements à :

Dieu tout puissant, pour la volonté, et la santé et la patience qu'il nous donnait durant toutes ces années d'études afin que nous puissions en arriver là.

Comme nous tenons à remercier notre

Encadreur :**M**r.**Toufik HERAIZ**.

Merci à tous les enseignants et les étudiants

De département **mathématique**

Pour leurs aides judicieuses, les moyens qu'ils ont

Met à notre disposition pour réaliser ce travail.

Enfin à toute personne qui a collaborée à la réalisation

Du présent mémoire.

Merci

Table des matières

Notations

$L(E, F)$ L'ensemble des applications linéaires de E dans F.

$C([a; b])$ Espace des fonction continue sur l'intervalle $[a; b]$.

$\ker(A)$ le noyau de l'opérateur A

$\mathrm{Im}(A)$ l'image de l'opérateur A

A^{-1} Inverse de l'opérateur A

$\overline{A}$ La fermeture de l'opérateur A

I Opérateur identité

A^* L'adjoint de l'opérateur A.

$C_0^\infty([a; b])$ L'espace des fonctions de classe $C^\infty([a; b])$ dont le support est un sous ensemble compact de $[a; b]$.

$\mathcal{D}(\mathcal{A})$ La domaine de l'opérateur non-borné A

$Gr(A), \Gamma(A)$ Le graph de A

$\rho(A)$ L'ensemble résolvant de A.

$R_\lambda(A)$ Résolvent de A.

$\sigma(A)$ spectre de A.

$\sigma_p(A)$ spectre ponctuel de A.

$\sigma_c(A)$ spectre continu de A.

$\sigma_r(A)$ spectre résiduel de A.

$\langle\ ,\ \rangle$ le produit scalaire.

$\|.\|$ la norme.

$L^2([a, b])$ L'espace des fonctions de carrés intégrables sur $[a, b]$, i.e. $\int_a^b |f(x)|^2 \, dx < \infty$.

$K(E), K(E, F)$ L'espace des opérateurs compacts de E, ou de E dans F.

H^2 l'espace sobolev.

$\triangle, \nabla^2$ la placien.

$C^1([a; b])$ L'espace des fonctions continument d erivables, ou de classe C^1 sur $[a; b]$.

$\mathcal{F}(f), \widehat{f}$ La transformation de Fourier .

Introduction.

Il serait difficile de faire une présentation exhaustive de l'étude de l'opérateur de Schrödingere en quelques pages, néanmoins ce mémoire donne un panorama partiel sur l'étude spectrale de cet opérateur. L'étude de l'opérateur de Schrödinger est très présente en physique, comme par exemple en mécanique quantique l'énergie d'une particule déplaçant dans l'espace ou une partie X de $\mathbb{R}^n$, si cette particule est soumise à un champ de force dérivant d'un potentiel réel V, est représentée par l'hamiltonien $H = -\frac{h^2}{2m}\triangle + V$, où m est la masse de la particule, h le constante de Planck, $\triangle$ le Laplacien et V est l'opérateur de multiplication par la fonction V . En notre travail on s'intéresse au problème spectral

Ce travail se décompose en trois chapitres :

Dans le 1^{er} chapitre , donne aperçu général sur les domaines, graphes, noyaux et image des opérateurs non bornés, les opérateurs fermés et les opérateurs fermable, puis la notion de l'adjoint et l'opérateur auto-adjoint dans les espaces de Hilbert, puis en fin le spectre et la résolvent

Dans le $2^{ème}$ chapitre, donne aperçu historique de mécanique quantique, et l'opérateur de Schrödinger libre c'est le cas où la particule n'est soumise à aucune force, l'hamiltonien est alors $H = -\frac{h^2}{2m}\triangle$

Dans le $3^{ème}$ chapitre, on présente l'opérateur de Schrödinger avec potentiel, ce qui répresente l'hamiltonien où la particule est soumise à un champ de force dérivant d'un potentièl V , alors $H = -\frac{h^2}{2m}\triangle + V$, en utilisant les théorèmes de perturbation (théorème kato-rellich, weyl, et presson), ainsi les résultats de stabilité du spectre.

Chapitre 1

Généralités sur les opérateurs non bornés dans un espace de Hilbert

Dans le premier chapitre de ce mémoire nous exposerons un rappel sur quelques définition et propriétés genérales sur les opérateur non borné(adjoint, auto adjoint, résolvante et spectre d'un opérateur non borné) .

1.1 Notions générales des opérateurs linéaires non bornés

Définition 1.1.1 ***(Domaine d'un opérateur)***

Soient E et F deux espaces vectoriels normés et A un opérateur linéaire défini de sous-espace vectoriel $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E$ dans F . $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ est appelé le domaine de l'opérateur A.

Remarque 1.1.1

Le domaine est une partie de la définition d'un opérateur. En effet on considère par exemple l'opérateur linéaire $A_1 : C^1(\mathbb{R}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R})$ donné par $A_1\varphi(x) = \varphi'(x)$. Et l'opérateur $A_2 : D(\mathbb{R}) \longrightarrow F$ est aussi donné par $A_2 f(x) = f\prime(x)$. nous somme avec deux opérateurs déférents. Il est clair que $A_2 \subset A_1$.

1.1.1 noyau, Image et Graphe d'un opérateur

Définition 1.1.2 ***(noyau,Image)***

1. On appelle **noyau** de T le sous-espace $\ker(T)$ tel que:

$$ker(T) = N(T) = \{x \in D(T) : T(x) = 0_X\} \text{ de } X$$

2. On appelle **Image** de T le sous-espace $\mathrm{Im}(T)$ de Y tel que:

$$\mathrm{Im}(T) = R(T) = T(D(T)) = \{Tx : x \in D(T)\}.$$

Définition 1.1.3 ***(Graphe d'un opérateur)***

Soient E et F deux espaces vectoriels et $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E \longrightarrow \mathrm{Im}(A) \subset F$ un opérateur. Le graphe de A est le sous ensemble $\Gamma(A) \subset E \times F$ défini par :

$$\Gamma(A) = \{(\varphi, A\varphi) : \varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})\}.$$

Définition 1.1.4 ***(le produit scalaire et la norme du graphe d'un opérateur)***

Soient H_1 et H_2 deux espaces de Hilbert et $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset H_1 \longrightarrow H_2$. Il est clair que :

$$\langle f, g \rangle_A = \langle f, g \rangle_{H_1} + \langle A\varphi, Ag \rangle_{H_2}, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$$

définie un ***produit scalaire*** *dans le domaine $\mathcal{D}(\mathcal{A})$. La norme correspondant*

$$\|\varphi\| = \sqrt{\|\varphi\|^2_{H_1} + \|A\varphi\|^2_{H_2}}, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}),$$

est appelée ***la norme du graphe*** *de l'opérateur A. Elle est équivalu à la norme*

$$\|\varphi\|'_A := \|\varphi\|_{H_1} + \|A\varphi\|_{H_2} \ \forall \varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}),$$

dans $\mathcal{D}(\mathcal{A})$.

1.2 Extension des opérateurs

Définition 1.2.1 ***(Extension des opérateurs)***

Soient E un espace vectoriel et $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E \longrightarrow E$ et $B : \mathcal{D}(\mathcal{B}) \subset E \longrightarrow E$ deux opérateurs linéaires. Alors on dit que A est une extension de B (ou bien B est une restriction de A) si :

$$\mathcal{D}(\mathcal{B}) \subset \mathcal{D}(\mathcal{A})$$

et

$$A\varphi = B\varphi$$

pour tout $\varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{B})$. Et on le note par $B \subset A$.

Exemple 1.2.1

Soient $A_k\varphi = \varphi''$avec $k = 1, 2, 3, 4$ des opérateurs différentiels dans $L^2[0, 1]$ avec leurs domaines :

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}_1) = \{\varphi \in C^2([0, 1]) : f(0) = f(1) = 0\},$$

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}_2) = C^2([0, 1])$$

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}_3) = \{\varphi \in H^2(0, 1]) : f(0) = f(1) = 0\}$$

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}_4) = \varphi \in H^2[0, 1]$$

comme $H^2([0, 1]) \subset C^2([0, 1])$, alors on a

$$A_1 \subset A_2 \subset A_4,$$

A_4 est une extension de A_2 et A_2 est une extension de A_1

et

$$A_1 \subset A_3 \subset A_4.$$

A_4 est une extension de A_3 et A_3 est une extension de A_1

Proposition 1.2.1

$B \subset A$ si et seulement si $\Gamma(B) \subset \Gamma(A)$.

1.3 Opérations sur les opérateurs linéaires

Définition 1.3.1

Soient E_1, E_2 et E_3 trois espaces vectoriels et $A : E_1 \longrightarrow E_2$, $B : E_1 \longrightarrow E_2$ et $C : E_2 \longrightarrow E_3$ trois opérateurs linéaires. Alors:

• *La multiple complexe αA pour $\alpha \in C$, $\alpha \neq 0$ est un opérateur linéaire défini de E_1 dans E_2 par :*

$$\begin{cases} \mathcal{D}(\alpha\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{A}) \\ (\alpha A)(f) = \alpha A(f), \forall A(f) \in \mathcal{D}(\alpha\mathcal{A}), \alpha \neq 0 \end{cases}$$

• *La somme $A + B$ est un opérateur linéaire défini de E_1 dans E_2 par :*

$$\begin{cases} \mathcal{D}(A + B) = \mathcal{D}(\mathcal{A}) \cap \mathcal{D}(\mathcal{B}), \\ (A + B)(\varphi) = A(\varphi) + B(\varphi), \forall \varphi \in \mathcal{D}(A + B). \end{cases}$$

• *La multiple αA pour $\alpha = 0$ par l'opérateur nul est défini de E_1 dans E_2 par :*

$$\begin{cases} \mathcal{D}(0) = E_1, \\ (0)(f) = 0, \forall f \in D(0). \end{cases}$$

• *Le produit CA est un opérateur linéaire défini de E_1 dans E_3 par :*

$$\begin{cases} \mathcal{D}(CA) = \{f \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) : A\varphi \in \mathcal{D}(C)\} \cap \mathcal{D}(\mathcal{B}), \\ (CA)(f) = C(A\varphi), \forall f \in \mathcal{D}(CA). \end{cases}$$

1.4 L'opérateur densément défini et l'opérateurs égaux

Définition 1.4.1 ***(Opérateur densément défini)***

Soient E un espace vectoriel normé et A un opérateur linéaire défini de sous-espace vectoriel $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E$ dans E. On dit que A est densément défini si son domaine est un sous ensemble dense de$E$, i.e

$\overline{\mathcal{D}(\mathcal{A})} = E.$

Exemple 1.4.1

Soit l'opérateur différentiel défini par $D\varphi(x) = -\dfrac{d\varphi(x)}{dx} = \varphi'(x)$ de $\mathcal{D}(D) \subset L^2(\mathbb{R})$ dans $L^2(\mathbb{R})$ où $\mathcal{D}(D) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R})$: f est dérivable. L'opérateur D est un opérateur densément défini dans $L^2(\mathbb{R})$ car l'espace $\mathcal{D}(D)$est dense dans $L^2(\mathbb{R})$.).

Définition 1.4.2 ***(Opérateurs égaux)***

Soient E un espace vectoriel et $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E \longrightarrow E$ et $B : \mathcal{D}(\mathcal{B}) \subset E \longrightarrow E$ deux opérateurs linéaires. Les deux opérateurs A et B sont égaux s'ils ont le même domaine

$\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{B})$ et ils coïncident sur ce domaine, i.e

$A\varphi = B\varphi, \forall \varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{B})$.

1.5 Opérateurs eur non borné

Définition 1.5.1 ***(Opérateur non borné)***

Soient E et F deux espaces vectoriels normés. On dit qu'un opérateur linéaire A défini sur $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E$ dans F est un opérateur non borné si :

- *$\mathcal{D}(\mathcal{A}) \neq E$.*

Remarque 1.5.1

Dans la pratique pour montrer que un opérateur A est non borné il suffit de trouver une suite $\varphi_n \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ telle que $\|\varphi_n\| \leq M$ (pour une constante M et tout $n \in N$) et $A\varphi_n \longrightarrow \infty$. Par conséquent

on peut montrer qu'un opérateur A est non borné par trouver une suite $\{\varphi_n\} \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ convergente vers 0 telle que la suite $\{\varphi_n\}$ ne converge pas vers 0.

Exemple 1.5.1

Soit $\mathcal{D}(D_1)$ un sous espace vectoriel de $C[0,1]$composé de toutes les

fonctions polynomiales, l'opérateur différentiel D_1 défini de $\mathcal{D}(D_1)$ dans $C[0,1]$par :

$$D_1\varphi(x) = \frac{d\varphi(x)}{dx} = \varphi'(x)$$

est un opérateur non borné.

En effet, on considère par exemple la suite des fonctions $\varphi_n(x) = x^n$, $n = 1, 2, 3, ...$ est clair que pour tout $n = 1, 2, 3, ...$,$\varphi_n \in \mathcal{D}(D_1)$.

En outre

$$\begin{aligned} \|\varphi_n\|_\infty &= \max_{x\in[0;1]} |\varphi_n(x)| \\ &= \max_{x\in[0;1]} |x^n| \\ &= 1 \end{aligned}$$

pour tout $n = 1, 2, 3, ...$

et

$$\begin{aligned} \|D_1\varphi_n\|_\infty &= \|\varphi_n\|_\infty \\ &= \|(x^n)'\|_\infty \\ &= \left\|nx^{n-1}\right\|_\infty \\ &= \max_{x\in[0;1]} \left|nx^{n-1}\right| \\ &\overset{n\to\infty}{=} \infty \end{aligned}$$

D'où l'opérateur D_1 *est un opérateur non borné dans* $C[0, 1]$.

Exemple 1.5.2

Soit $\mathcal{D}(D_2)$ *un sous espace vectoriel de* $L^2[0, 1]$ *composé de toutes les fonctions continûment dérivables sur* $[0, 1] \in \mathbb{R}$ *(i.e* $\mathcal{D}(D_2) = C^1[0, 1]$*), l'opérateur différentiel* D_2 *défini de* $\mathcal{D}($ *dans* $L^2[0, 1]$ *par :*

$$D_2\varphi(x) = \frac{d\varphi(x)}{dx} = \varphi'(x)$$

est un opérateur non borné.

En effet, on considère par exemple la suite des fonctions $\varphi_n(x) = x^n$, $n = 1, 2, 3, ...$ *est clair que pour tout* $n = 1, 2, 3, ..., \varphi_n \in \mathcal{D}(D_2)$. *En autre,*

$$\begin{aligned} \|\varphi_n\|_2^2 &= \int_0^1 |\varphi_n(x)|^2 \, dx \\ &= \int_0^1 x^{2n} dx \\ &= \frac{1}{2n+1} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \|D_2\varphi_n\|_2^2 &= \int_0^1 |D_2\varphi_n(x)|^2 \, dx \\ &= \int_0^1 \left|nt^{n-1}\right|^2 dx \\ &= \int_0^1 n^2 t^{2n-2} dx \\ &= \frac{n^2}{2n-1} \end{aligned}$$

Encore ona:

$$\frac{\|D_2 f_n\|_2}{\|\varphi_n\|_2} = n\sqrt{\frac{2n+1}{2n-1}} \longrightarrow \infty$$

D'où l'opérateur D_2 est un opérateur non borné dans $L^2[0,1]$.

Exemple 1.5.3

Soit $\mathcal{D}(D_3)$ un sous espace vectoriel de $L^2(\mathbb{R})$ composé de toutes les fonctions de carré intégrable sur $\mathbb{R}$ et leurs dérivées premières et secondes sont de carré intégrable sur $\mathbb{R}$ (i.e $\mathcal{D}(D_3) = H^2(\mathbb{R})$, l'opérateur laplacien de dimension-un D_3 définie $\mathcal{D}(D4)$ dans $L^2[0,1]$ par :

$$D_3\varphi(x) = \frac{-d^2\varphi(x)}{dx^2} = -f''(x)$$

est un opérateur non borné.

En effet, on considère par exemple la suite des fonctions $\varphi_n(x) = exp{-}n|x|$, $n = 1, 2, 3, ...$ est clair que pour tout n = 1, 2, 3, ..., $\varphi_n \in \mathcal{D}(D4)$. En autre,

$$\begin{aligned} \|\varphi_n\|_2^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 \, dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp -2n\,|x| \, dx \\ &= \frac{1}{n} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \|D_3\varphi_n\|_2^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} |D_3 f_n(x)|^2 \, dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} n^4 \exp -2n\,|x| \, dx \\ &= n^3 \end{aligned}$$

Encore on a,

$$\frac{\|D_3\varphi_n\|_2^2}{\|\varphi_n\|_2} = n^3 \to \infty$$

D'où l'opérateur D_3 est un opérateur non borné dans $L^2[0,1]$.

Remarque 1.5.2

Les opérateurs non bornés peuvent être seulement dans les espaces de dimension infinie parce que dans les espaces de dimension finie tous les opérateurs linéaires sont bornés.

1.6 inverse d'un opérateur

Définition 1.6.1 ***(inverse d'un opérateur non borné)***

soient H_1 et H_2 deux espaces de Hilbert et $A : D(A) \subset H_1 \to H_2$ un opérateur linéaire bijectif. On définit l'opérateur A^{-1} défini de H_2 dans H_1 tel que:$AA^{-1}g = g, \forall g \in H_1$ et

$A^{-1}Af = f, \forall f \in D(A)$.

L'opérateur A^{-1} est dit l'inverse de A.

Proposition 1.6.1

Soit $T : D(T) \subset X \longrightarrow Y$. un opérateur linéaire de noyau $\ker = \{0\}$, C'est-à- dire injecrif, on peut définir son inverse T^{-1} comme opérateur de Y dans X de domaine $\mathrm{Im}(T)$ tel que

$$\varphi = T^{-1}\psi \Longleftrightarrow \psi = T\varphi$$

On a alors la propriété suivante :

L'image de T^{-1} coïncide avec le domaine de T :

$$\operatorname{Im} T^{-1} = D(T)$$

1.7 Opérateurs fermés

Définitions et propriétés

Définition 1.7.1 ***(Opérateurs fermés)***

Soient E et F deux espaces normés. Un opérateur $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E \longrightarrow F$ est dit fermé si pour toute suite (φ_n) de $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ telle que:

$$\begin{array}{c} \varphi_n \longrightarrow f \text{ dans } E \\ \text{et} \\ A\varphi_n \longrightarrow g \text{ dans } F \end{array} \qquad \text{ona alors: } f \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \text{ et } A\varphi = g.$$

Théorème 1.7.1

L'inverse d'un opérateur fermé est fermé.

Preuve.

soit $A : \mathcal{D(A)} \subset E \longrightarrow F$ un opérateur fermé, alors:

$$\Gamma(A) = \{(f, Af) : f \in \mathcal{D(A)}\}$$

est fermé, d'où:

$$\Gamma(A^{-1}) = \{(Af, f) : f \in \mathcal{D(A)}\}$$

est fermé. Ceci montre que A^{-1}est fermé. ■

Remarque 1.7.1

Si E et F deux espace de banach et $A : \mathcal{D(A)} \subset E \longrightarrow F$ un opérateur fermé non borné, alors $\mathcal{D(A)}$ ne peut pas être fermé car : si $\mathcal{D(A)}$ est fermé, donc $\mathcal{D(A)}$ est un espace de banach, alors le théorème du graphe fermé implique que A est borné, d'où $\mathcal{D(A)}$ n'est pas fermé, en particulier

$\mathcal{D(A)} \neq E$ car E est fermé .

Comparaison entre les opérateurs bornés et les opérateurs fermés

Notons soigneusement la différence entre les opérateurs continus et les opérateurs fermés.

Pour un opérateur continu A , la convergence de la suite (φ_n) implique la convergence de la suite $(A\varphi_n)$, et

$$\lim_{n\to\infty} A\varphi_n = A(\lim_{n\to\infty} \varphi_n) = A(\varphi) \tag{1.7.1}$$

Pour un opérateur fermé A, la convergence de la suite (φ_n) n'implique pas la convergence de la suite $(A\varphi_n)$, mais si tous les deux (φ_n) et $(A\varphi_n)$ sont convergentes, alors (1.7.1) est vérifiée. Autrement dit :

L'opérateur A est fermé si :

$$\begin{cases} \varphi_n \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \\ \varphi_n \longrightarrow \varphi \\ A\varphi_n \longrightarrow g \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} \varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \\ A\varphi = g \end{cases}$$

L'opérateur A est continus si :

$$\begin{cases} \varphi_n \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \\ \varphi_n \longrightarrow \varphi \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} \varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \\ A\varphi_n \longrightarrow g \\ A\varphi = g \end{cases}$$

Proposition 1.7.1

Soient E et F deux espaces normés et un opérateur $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E \longrightarrow F$. Alors A est fermé si et seulement si son graphe $\Gamma(A)$ est un sous-espace fermé de $E \times F$.

Proposition 1.7.2

Soient H_1 et H_2 deux espaces de Hilbert et un opérateur $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset H_1 \longrightarrow H_2$. Les affirmations suivantes sont équivalentes :

1) A est fermé.

2) Le graphe $\Gamma(A)$ est un sous-espace fermé de $H_1 \times H_2$.

3) $(\mathcal{D}(\mathcal{A}), \|.\|_A)$ est complet, ou $(\mathcal{D}(\mathcal{A}), \langle ., . \rangle_A)$ est un espace de Hilbert.

Théorème 1.7.2 ***(Théorème du graphe fermé)***

Soient E et F deux espaces de Banach et $A : E \longrightarrow F$. Si le graphe $\Gamma(A)$ est fermé de $E \times F$, alors A est borné.

Preuve. Voir [2]. ■

Proposition 1.7.3

Soient E et F deux espaces de Banach et $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E \longrightarrow F$ un opérateur fermé. Alors A est borné si et seulement si $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = E$.

Preuve. En appliquant le théorème du graphe fermé. ■

Lemme 1.7.1

Un sous-espace vectoriel Θ de $E \times F$ est le graphe d'un opérateur de E dans F si et seulement si :

$$((0_E, y) \in \Theta, y \in F) \implies y = 0_F$$

.

Preuve. Voir [11]. ∎

Proposition 1.7.4

Tout opérateur linéaire borné $A : E \longrightarrow F$ est fermé.

Preuve.

Supposons que $(\varphi_n) \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ telle que $\varphi_n \longrightarrow f$ dans E avec $A\varphi_n \longrightarrow g$

dans F. Comme A est borné, donc $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = E$. Alors d'après la continuité de A il est clair que $f \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ et $A\varphi = g$. ∎

Proposition 1.7.5

Soient $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E \longrightarrow E$ un opérateur fermé et $B \in \mathcal{L}(E)$, alors $A + B$ est fermé.

Preuve.

Supposons que $(\varphi_n) \in D(A + B) = \mathcal{D}(\mathcal{A})$ telle que $\varphi_n \longrightarrow f$ et $(A + B)\varphi_n \longrightarrow g$ dans E. Comme B est borné, donc $A\varphi_n \longrightarrow g$, $B\varphi$ dans E , comme A est fermé, donc $\varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ et $A\varphi = g -$ $B\varphi$, alors $(A + B)\varphi = g$, d'ou $A + B$ est fermé. ∎

1.8 Opérateurs fermables

Définitions et propriétés

Définition 1.8.1 ***(Opérateurs fermables)***

Soient E et F deux espaces normés. Un opérateur $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset E \longrightarrow F$ est dit fermable s'il admet une extension fermée, i.e il existe un opérateur fermé $T : \mathcal{D}(T) \subset E \longrightarrow F$ tel que $A \subset T$.

Proposition 1.8.1

Soient E et F deux espaces normés et $A : \mathcal{D(A)} \subset E \longrightarrow F$ un opérateur. Les affirmations suivantes sont équivalentes :

1) A est fermable.

2) Pour toute suite (φ_n) de $\mathcal{D(A)}$ telle que $\varphi_n \longrightarrow 0$ dans E et $A\varphi_n \longrightarrow g$ dans F, on a alors : $g = 0$.

3) $\Gamma(A)$ est un graphe d'un opérateur linéaire (nécessairement fermé).

Définition 1.8.2 ***(Fermeture d'un opérateur)***

Soient E et F deux espaces normés. Si l'opérateur $A : \mathcal{D(A)} \subset E \longrightarrow F$ est fermable, alors sa fermeture est un opérateur noté par A. L'opérateur A est la plus petite extension fermée de$A$.

L'opérateur A est défini par :

$$\begin{cases} \mathcal{D}(\overline{\mathcal{A}}) = \{\varphi \in E : \exists(\varphi_n) \in \mathcal{D(A)}, \varphi_n \longrightarrow \varphi, A\varphi_n c.v\}, \\ \overline{A}\varphi = \lim\limits_{n\to\infty} A\varphi_n, \forall \varphi \in \mathcal{D(A)}. \end{cases}$$

Remarque 1.8.1

Si $\overline{A} = A$, alors A est fermé.

Proposition 1.8.2

Soit $A : \mathcal{D(A)} \subset E \longrightarrow F$ un opérateur fermable. Alors $\Gamma(\overline{A}) = \overline{\Gamma(A)}$.

Proposition 1.8.3

Si A est fermable, B fermé et $A \subset B$, alors $A \subset B$.

Remarque 1.8.2

Toute extension fermée de A est aussi une extension de A.

1.8.1 Exemples des opérateurs fermés et des opérateurs fermables

Exemple 1.8.1

Soit $A : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset L^2(\mathbb{R}^n) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ *défini par :*

$$A\varphi = -\triangle f, \forall f \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$$

où :

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}) = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$$

Clairement, A *est fermable et sa fermeture donnée par :*

$$\begin{cases} \mathcal{D}(\overline{\mathcal{A}}) = H^2(\mathbb{R}^n) \\ \overline{A}\varphi = \lim_{n\to\infty} Af_n = -\triangle f, \forall x \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{A}}) = H^2(\mathbb{R}^n) \end{cases}$$

Exemple 1.8.2

Soient $A_k\varphi(x) = if\prime(x)$ *avec* $k = 1, 2$ *deux opérateurs différentiels dans* $L^2[0, 1]$ *avec leurs domaines :*

$D(A_1) = \{\varphi \in H^1([0, 1]) : \varphi(0) = \varphi(1)\}$

$D(A_2) = \{\varphi \in H^1([0, 1]) : \varphi(0) = \varphi(1) = 0\}$

- *Les deux opérateurs* $T1$ *et* $T2$ *sont fermés.*

1.9 L' opérateur adjoint:

Définition 1.9.1

Soit A *un opérateur dans un espace de Hilbert* H. *On note* A^* *l'ensemble des vecteurs* $v \in H$ *pour lesquels il existe* $\varphi \in H$ *tel que:*

$$\langle Au, v\rangle = \langle u, \varphi\rangle \qquad \text{pour tout } u \in \mathcal{D}(A) \tag{1.9.1}$$

Pour tout $v \in \mathcal{D}(A^*)$ *on pose* $A^*v = \varphi$. *où* φ *désigne le vecteur vérifiant (1.9.1).*

On appelle A^* *l'opérateur adjoint de* A.

par définition on a:

$$\langle Au, v\rangle = \langle u, A^*v\rangle, \forall v \in \mathcal{D}(A^*), \forall u \in \mathcal{D}(A)$$

Théorème 1.9.1

Soit A un opérateur dans H. Alors les propriétés suivantes :

(i) A^* est fermé.

(ii) A est fermable si et seulement si $\mathcal{D}(A^*)$ est dense, et dans ce cas $\overline{A} = A^{**}$.

(iii) Si A est fermable, alors $(\overline{A})^* = A^*$.

1.10 L' opérateurs auto-adjoint:

Définition 1.10.1 ***(Opérateur auto-adjoint)***

Soient H un espace de Hilbert et $.A : \mathcal{D}(A) \subset H \longrightarrow H$ un opérateur densément défini. On dit que A est auto-adjoint si : $A = A^*$ i.e :

$\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^*)$ et $A\varphi(x) = A^*\varphi(x)$.

1.11 L' opérateur symétrique

Définition 1.11.1 ***(opérateur symétrique)***

Un opérateur A dans un espace de Hilbert est dit symétrique si $A \subset A^*$, c'est-à-dire:

$$\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^*), Au = A^*u \quad pour \quad u \in \mathcal{D}(A)$$

Il est claire que A est symétrique si et seulement si$\langle Au, v\rangle = \langle u, Av\rangle \quad pour \quad u \in \mathcal{D}(A)$

$$\langle Au, v\rangle = \langle u, Av\rangle \quad pour \quad u \in \mathcal{D}(A)$$

Exemple 1.11.1

Soit D l'opérateur différentiel défini do $C_0(\mathbb{R})$ dans $C_0(\mathbb{R})$ par :

$$D\varphi(x) = i\frac{d\varphi(x)}{dx} = i\varphi'(x)$$

(où $C_0(\mathbb{R})$ désigne l'espace des fonctions continue sur $\mathbb{R}$ s'annulent à l'infini). Alors l'opérateur D est un opérateur auto-adjoint En effet

$$\begin{aligned}
\langle D\varphi, \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} i \frac{d\varphi(x)}{dx} \overline{\psi(x)} \\
&= -i \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \frac{\overline{d\psi(x)}}{dx} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \left[i \frac{\overline{d\psi(x)}}{dx} \right] dx \\
&= \langle \varphi, D\psi \rangle
\end{aligned}$$

Lemme 1.11.1

Soit T un opérateur symétrique fermé $\lambda \in \mathbb{C}$.

$$ker(T^* + \lambda) = R(T + \overline{\lambda})^{\perp}$$

En particulier:

$$(ker(T^* + i) = \{0\}) \Longleftrightarrow \overline{(R(T - i)} = H)$$

Proposition 1.11.1

soit T un opérateur symétrique. Les assertions suivantes sont équivalentes:

1.T est auto-adjoint

2.T est fermé, et $ker(T^* \pm i) = \{0\}$

3.$R(T \pm i) = H$

Preuve.

Supposons 1.Soit $u \in D(T^*) = D(T), Tu = T^*u = iu$.

$\langle Tu, u \rangle = i \langle u, u \rangle = \langle u, Tu \rangle = -i \langle u, u \rangle$

Donc $u = 0$, et 2. est vraie.

Supposons 2. D'après le lemme (1.11.1) est d'image dense. Mais cette image est aussi fermée :en effet pour tout u $\in D(T)$ on a:

$$\|(T - i)u\|^2 = \|Tu\|^2 + \|u\|^2$$

Donc si u_n est une suite dans $D(T)$ telle que $(T - i)u_n \longrightarrow V$, alors un $u_n \longrightarrow u$, et Tu_n converge aussi. Puisque T est fermé, u$\in D(T)$ et $(T - i)u = V$. $R(T - i) = H$, et de même avec le signe $+$.

Supposons 3. Soit $u \in D(T^*)$. Montrons que $u \in D(T)$. Puisque $(T-i)$ est surjectif, il existe $v \in D(T), (T-i)v = (T^*-i)u$.puisque $D(T) \subset D(T^*)$,le vecteur $u-v$

appartieint au domaine de T^* et $(T^*-i)(u-v) = 0$.

Mais d'après le lemme précédent T^*-i est injectif, donc $u = v \in D(T)$.

La notion d'opérateur essentiellement auto-adjoint permet de parler d'extension auto-adjointe l'un opérateur symétrique, sans pour autant avoir à déterminer le

domaine de cette extension. ■

Définition 1.11.2

Soit A un opérateur symétrique. On dit que A est essentiellement auto-adjoint si sa fermeture est auto-adjoint.

Proposition 1.11.2

Soit A un opérateur symétrique dans H. Alors les propriétés suivantes sont ´équivalentes:

(i) A est auto-adjoint.

(ii) A est fermé et $Ker(A^* \pm iI) = \{0\}$.

(ii i) $Im(A \pm iI) = H$.

Preuve. voir[5] ■

1.12 les spectres et la résolvante

1.12.1 la résolvante

Définition 1.12.1 ***(L'ensemble résolvant)***

Soit Eun espace normé, et A un opérateur fermé dans E. L'ensemble résolvant de A, noté $\rho(A)$, est constitué de tous les nombres $\lambda \in \mathbb{C}$ tels que l'opérateur $\lambda I - A$ est une bijection de $\mathcal{D}(A)$ sur E avec un inverse borné.

Définition 1.12.2 ***(la résolvante)***

l'opérateur $R_\lambda(A) = (\lambda I - A)^{-1}$ est appelé la résolvante de A au point λ.

1.12.2 les spectres

Définition 1.12.3 *(le spectre)*

Le complémentaire de $\rho(A)$ dans $\mathbb{C}$, noté $\sigma(A)$, s'appelle le spectre de A.

$$\begin{aligned} \sigma(T) &= \mathbb{C}/\rho(T). \\ & \textit{donc} \\ \sigma(T) &= \{\lambda \in \mathbb{C} \setminus \lambda \notin \rho(T) \end{aligned}$$

Soit T un opérateur non-borné fermé. On dite que λ est une valeur regulière de T si: $T - \lambda I : D(T) \longrightarrow H$ est une application linéaire bijective de $D(T)$ sur H, avec T^{-1}un inverse continue;

1. Si T n'est pas fermé, T n'admet aucune valeur regulière, donc on a toujours $\sigma(T) = \mathbb{C}$

$R_\lambda(T)$est borné de $\mathrm{Im}(T - \lambda I)$ dans $D(T)$ c'est- à-dire

$$\forall C \geq 0tq : \|R_\lambda(T)u\| \leq C\,\|u\|\,\forall u \in \mathrm{Im}(T - \lambda I)$$

$\sigma(T)$ est appelé le spectre de l'opérateur T on a :

- $\sigma(T) = \mathbb{C}/\rho(T)$
- $\mathbb{C} = \sigma(T) \cup \rho(T)$
- $\sigma(T) \cap \rho(T) = \varnothing$
- $\sigma(T)$ peut être décomposé en trois ensembles deux à deux disjoints notés :
- $\sigma_p(T)$,$\sigma_c(T)$,$\sigma_r(T)$. Ils sont définis comme suivants:

Définition 1.12.4 *(le spectre ponctuel)*

$\sigma_p(T) = \{\lambda \in \mathbb{C}, (T - \lambda I)$ *n'est pas inversible (n'est pas injective) de* $D(T)$ *dans* $\mathrm{Im}(T - \lambda I)\}$.

σ_p est appelé spectre ponctuel de T.

C'est-à-dire il existe $x \neq 0$ tel que $Tx = \lambda x$, alors on dit que λ est un valeur propre de T et x est un vecteur propre associé à λ.

L'ensemble des valeurs propres d'un opérateur T est appelé le spectre ponctuel de T.

Définition 1.12.5 ***(le spectre continu)***

$\sigma_c(T) = \{\lambda \in \mathbb{C}, (T - \lambda I)$ inversible de $D(T)$ dans $\mathrm{Im}(T - \lambda I)$ et $\mathrm{Im}(T - \lambda I)$ est dense dans $H; R_\lambda(T)$ n'est pas borné $\}$.

σ_c est appelé le spectre continu de T.

Notation 1.12.1 ***Définition 1.12.6 (le spectre résiduel)***

$\sigma_r = \{\lambda \in \mathbb{C}, (T - \lambda I)$ inversible de $D(T)$ dans $\mathrm{Im}(T - \lambda I)$ et $\mathrm{Im}(T - \lambda I)$ n'est pas dense dans $H\}$.

C'est-à-dire tout $\lambda \in \sigma(T)$ tel que λ n'est pas un valeur propre et $Ran(\lambda I - T)$ n'est pas dense dans H.

σ_r est appelé le spectre résiduel de T.

Exemple 1.12.1

$H = L^2(\mathbb{R})$ et A l'opérateur de multiplication par la fonction $\varphi(x) = x$ tel que:

$$A\varphi(x) = x\varphi(x)$$

de domaine

$$D(A) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}), x\varphi(x) \in L^2(\mathbb{R})\}$$

Alors $D(A)$ est dense dans $L^2(\mathbb{R})$ et A est outo-adjoint. Donc:

- $\sigma_p(A) = \varnothing$
- $\sigma_c(A) = \mathbb{R}$
- $\sigma_r(A) = \varnothing$
- $\rho(A) = \mathbb{C} \diagup \mathbb{R}$

Si A est un opérateur fermé symétrique et $\sigma(A)$ ne contient pas $\mathbb{R}$, alors A est auto-adjoint.

1.12.3 Spectre essentiel

Définition 1.12.7 ***(Fredholm)***

Un opérateur linéaire A est dit de Fredholm si:

1. Son noyau est de dimension finie.

2. Son image est fermée et de codimension finie.ou la codimension la dimonsion de l'espace$(H)/\operatorname{Im}(A)$.

   Son indice est alors défini par:

$$ind(A) = \dim Ker(A) - co \dim \operatorname{Im}(A).$$

Rappelons au passage que si A est fermé à domaine dense, $\overline{\operatorname{Im} A} = \ker A^*$. Donc pour un opérateur de Fredholm, fermé et à domaine dense,$co \dim \operatorname{Im} A = \dim \ker A^*$.

Proposition 1.12.1

Soit A un opérateur de Fredholm, fermé et à domaine dense dans un espace de Hilbert H. Alors son adjoint A^* est aussi un opérateur de Fredholm, ona

$$H = \ker A \oplus \operatorname{Im} A^* = \ker A^* \oplus \operatorname{Im} A,$$

et

$$indA = -indA^*$$

.

De plus, A est bijectif si et seulement si A^* est bijectif.

Définition 1.12.8 ***(Spectre essentiel)***

Le spectre essentiel d'un opérateur linéaire fermé est l'ensemble

$$\sigma_{ess}(A) := \{\lambda \in \mathbb{C}; (\lambda - A)\ n'est\ pas\ un\ opérateur\ de\ Fredholm\ d'indice\ 0\}.$$

On voit immédiatement avec cette définition que la réunion du spectre ponctuel et du spectre essentiel couvre tout le spectre. En effet, l'ensemble des valeurs propres et le spectre essentiel alors sont évidemment inclus dans le spectre. Inversement, si λ n'appartient ni à l'un ni à l'autre,$0 = \dim \ker(\lambda - A) = co \dim \operatorname{Im}(\lambda - A)$,

et donc $(\lambda - A)$ est une bijection de $D(A)$ sur X, ce qui signifie que appartient à l'ensemble résolvant de A. Donc

$$\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_{ess}(A).$$

Cependant il ne s'agit pas a priori d'une réunion disjointe. En effet, l'intersection $\sigma_{ess}(A) \cap \sigma_p(A)$ *est composée des valeurs propres* λ *pour lesquelles*

1. Soit $\ker(\lambda - A)$ n'est pas de dimension finie,

2. Soit $\mathrm{Im}(\lambda - A)$ n'est pas fermé,

3. Soit $\dim\ker A \neq co\dim \mathrm{Im}\, A$.

On peut de plus décomposer:

$$\sigma_{ess}(A)\backslash\sigma_p(A) = \{\lambda \in \mathbb{C}; Ker(\lambda - A) = \{0\} \text{ } et \text{ } \mathrm{Im}(\lambda - A) \subsetneq X\}.$$

Proposition 1.12.2

Soit A *auto-adjoint, et* $\lambda \in \sigma \setminus \sigma_{ess}$. λ *est alors isolé dans le spectre, et c'est une valeur propre de multiplicité finie.*

1. $\sigma_c(A) = \{\lambda \in \sigma_{ess}(A)\backslash\sigma_p(A); \overline{\mathrm{Im}(\lambda - A)} = X\}$.

2. $\sigma_r(A) = (\sigma_{ess}(A)\backslash\sigma_p(A))$.

Définition 1.12.9 ***(opérateur compact)***

Un opérateur linéaire K *sur un espace de Banach* X *est dit compact si l'image par* K *de tout ensemble borné* X *est relativement compact. Dans ce cas, on note* $K \in \mathcal{K}(X)$.

Lemme 1.12.1

Si A *est un opérateur de Fredholm, si* K *est un opérateur compact, alors* $A + K$ *est un opérateur de Fredholm de même indice.*

Théorème 1.12.1

Si A *est un opérateur linéaire fermé et à domaine dense dans* X, *alors pour tout* $K \in \mathcal{K}(X)$, $\sigma_{ess}(A + K) = \sigma_{ess}(A)$. *De plus, on a:*

$$\sigma_{ess}(A) = \bigcap_{K \in \mathcal{K}(X)} \sigma(A + K).$$

Preuve. voir[8] ∎

Chapitre 2

L'opérateur de schrödinger

2.1 Histoire de la mécanique quantique

La mécanique quantique est la science la plus mystérieuse. Elle traite du niveau le plus fondamental de la réalité, celui des particules (atomes, électrons, photons, . . .). La

mécanique quantique a fait entrer dans la physique des concepts radicalement nouveaux : dualité onde-corpuscule, superposition d'états, effet de l'observateur, probabilités, etc...

Par ailleurs, la mécanique quantique est un sujet favori pour ceux qui tiennent des discours irrationnels sur la réalité, qu'ils soient philosophes, gourous du nouvel-age ou même

physiciens.

Ainsi, la mécanique quantique nous révèlerait une réalité indéfinie, indéterministe, contradictoire et subjective ; il existerait un lien profond entre la conscience et le niveau

le plus ultime de la réalité, retour de l'humain au centre de l'univers. Mais pour bien mettre en évidence la relation et le passage de la mécanique classique à

la mécanique quantique, étudions d'abord les principaux traits de la mécanique classique.

2.2 Erwin schrödinger (12 août 1887 – 4 janvier 1961)

Erwin Rudolf Josef Alexander schrödinger est un physicien et théoricien scientifique autrichien. En imaginant l'équation d'évolution de la fonction d'onde associée à l'état d'une par-ticule, il a permis le développement du formalisme théorique de la mécanique quantique.

Cette équation d'onde qui tient compte à la fois de la quantification et de l'énergie non relativiste a été appelée par la suite équation de schrödinger (pour laquelle il a reçu, en commun avec Paul Dirac, le prix Nobel de physique de 1933).

Il est également connu pour asoumis l'étonnante expérience de pensée, nommée plus tard du Chat de schrödinger, à la suite d'une importante correspondance avec Albert Einstein en 1935.

2.3 Equation de schrödinger

La question qui se pose est maintenant la suivante : si on poursuit le parallèle avec le mouvement d'une particule, il faut alors trouver une équation pour décrire la fonction d'onde $\Psi(r,t)$. Vous pouvez par exemple vous poser la question suivante : soit un atome d'hydrogène formé d'un proton et d'un électron. La fonction d'onde $\Psi(r)$ permet de calculer la densité de probabilité $\|\Psi\|^2$ de touver l'électron en un point r. Mais comment trouver la fonction d'onde Ψ?

Ce fut le mérite du physicien autrichien E. schrödinger d'aposé l'équation qui donne l'évolution de $\Psi(r,t)$ connue sous le nom d'**équation de schrödinger dépendante du temps** :

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = \left[-\frac{h^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\Psi(r,t)$$

ou:
$h = \dfrac{h}{2\pi} = 1.05457.10^{-34}$ Js.
∇^2 est le laplacien.

m la masse de la particule,

$V(r)$ l'énergie potentielle de la particule au point r.

Lorsque l'on cherche une solution de Ψ qui ne dépend pas du temps (solution- stationnaire),

l'**équation de schrödinger indépendante du temps s'écrit :**

$$\left[-\frac{h^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\Psi(r) = E\Psi(r)$$

Discussion

a) D'où vient l'équation de schrödinger ?

Cette équation est postulée (tout comme, par exemple, l'équation de Newton). Sa validité est prouvée par les conséquences que l'on peut en tirer.

b) L'équation de schrödinger est une équation au premier ordre par rapport au temps.

La connaissance de $\Psi(r, t = 0)$ suffit pour déterminer l'évolution de $\Psi(r, t)$. En effet, dans l'approche probabiliste de Born, Ψ permet de trouver la probabilité de trouver la particule autour de r en tout temps. La connaissance seule de $\Psi(r, t = 0)$ doit donc suffire pour déterminer l'évolution.

c) L'équation de schrödinger est linéaire. Si Ψ_1 et Ψ_2 en sont des solutions, alors

$$\Psi_3(r, t) = \alpha\Psi_1(r, t) + \beta\Psi_2(r, t)$$

est aussi solution de l'équation de schrödinger.

d) La fonction d'onde Ψ est dite normalisée si

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi * \Psi d^3r = 1$$

e) Conditions sur Ψ: la condition de normalisation précédente impose que Ψ soit de carré sommable. L'interprétation de Born sur $\|\Psi\|^2$ interdit que Ψ possède plusieurs valeurs pour une seule valeur de r. De plus, comme l'équation de schrödinger fait intervenir la dérivée seconde à travers le laplacien ∇^2, Ψ et ses premières dérivées doivent être continues. Il y a donc de fortes restrictions sur la classe des fonctions Ψ. .

Du point de vue mathématique, Ψ est un élément d'un espace de Hilbert. En effet, nous avons :

- la propriété de linéarité : si Ψ_1 et Ψ_2 sont des solutions de l'équation de schrödinger à carré sommable, alors

$$\Psi = \lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$$

avec λ_1 etλ_2 appartenant à $\mathbb{C}$ est solution de l'équation de schrödinger. Ψ est aussi de carré sommable :

$$\begin{aligned}\|\Psi\|^2 &= \int(\lambda_1\Psi_1+\lambda_2\Psi_2)(\lambda_1\Psi_1+\lambda_2\Psi_2)^*d^3r \\ &\int[\lambda_1\lambda_1^*\Psi_1\Psi_1^*+\lambda_2\lambda_2^*\Psi_2\Psi_2^*+\lambda_1\lambda_2^*\Psi_1\Psi_2^*+\lambda_2\lambda_1^*\Psi_2\Psi_1^*]d^3r\end{aligned}$$

les fonctions Ψ_1 et Ψ_2 étant de carré sommable, les 4 termes de l'intégrale convergent.

- l'existence d'un produit scalaire entre Ψet φ défini comme

$$\langle\Psi,\varphi\rangle = \int d^3r\psi*\varphi$$

si $\langle\Psi,\varphi\rangle = 0, \Psi$et φ sont dit orthogonaux.

Le carré de la norme de Ψest

$$\|\Psi\|^2 = \langle\Psi,\Psi\rangle \geq 0$$

Le produit scalaire satisfait la propriété

$$\langle\Psi,\varphi\rangle = \langle\varphi,\Psi\rangle^*$$

Il est linéaire par rapport à ' :

$$\begin{aligned}\langle\Psi,\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2\rangle &= \lambda_1\int\Psi*\varphi_1d^3r+\lambda_2\int\Psi^*\varphi_2d^3r \\ &= \lambda_1\langle\Psi,\varphi_1\rangle+\lambda_2\langle\Psi_2,\varphi_2\rangle\end{aligned}$$

De même :

$$\begin{aligned}\langle\Psi,\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2\rangle &= \lambda_1^*\int\Psi*\varphi_1d^3r+\lambda_2^*\int\Psi^*\varphi_2d^3r \\ &= \lambda_1^*\langle\Psi,\varphi_1\rangle+\lambda_2^*\langle\Psi_2,\varphi_2\rangle\end{aligned}$$

Finalement, le produit scalaire satisfait l'inégalité de Schwarz :

$$\|\langle\Psi,\varphi\rangle\| \leq \sqrt{\langle\Psi,\Psi\rangle\langle\varphi,\varphi\rangle}$$

2.4 Transformation de Fourier

L'analyse de Fourier fait l'objet de nombreux ouvrages. En voici quelques éléments utiles pour la suite.

La transformation de Fourier $\mathcal{F}$ est par définition un isomorphisme de $L^2(\mathbb{R};\mathbb{C})$ (simplement noté $L^2(\mathbb{R})$ dans la suite) tel que, pour tout $f \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}f(\xi) &= \int f(x)e^{-ix\xi}dx,\ \xi \in \mathbb{R}, \\ \mathcal{F}^{-1}f(x) &= \int f(\xi)e^{ix\xi}dx,\ x \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

À un facteur près c'est une isométrie, car en vertu du théorème de Plancherel on a pour tout $f \in L^2(\mathbb{R})$,

$$\|\mathcal{F}f\|_{L^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\|f\|_{L^2}.$$

La transformation de Fourier laisse invariante la classe de Schwartz

$$S(\mathbb{R}) = \{f \in C^\infty(\mathbb{R}); \text{quels que soient } j, p \in \mathbb{C}; sup_{x\in\mathbb{R}}(1+|x|)^p \left|\partial^j f(x)\right| < +\infty\}$$

ensemble contenant notamment les gaussiennes

$$f : x \mapsto e^{-a(x-m)^2}$$

pour $a \in \mathbb{R}^{+*}$ et $m \in \mathbb{R}$, de transformées de Fourier

$$\hat{f} : \xi \mapsto \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{im\xi}e^{-\xi^2/(4a)}.$$

En outre, pour tout $f \in S(\mathbb{R})$,

$$\mathcal{F}(\partial_x^j f)(\xi) = (i\xi)^j \mathcal{F}f(\xi), \xi \in \mathbb{R}.$$

Si f est de classe C^∞ à support compact, sa transformée de Fourier $\widehat{f}$ se prolonge en une fonction analytique sur $\mathbb{C}$. En effet, si $K = supp(f)$,

$$\widehat{f}(\xi) = \int_K f(x)e^{-i\xi x}dx$$

Lemme 2.4.1 *La transformation de Fourier l'space de schwartz*

$\mathcal{F} : S(\mathbb{R}^n) \longrightarrow S(\mathbb{R}^n) \qquad \alpha \in \mathbb{N}_0^n$

$f \in S(\mathbb{R}^n)$

$$\widehat{(\partial_\alpha f)}(p) = (ip)^\alpha \widehat{f}(p), (\widehat{x^\alpha f(x)})(p) = i^{|\alpha|}\partial_\alpha \widehat{f}(p)$$

2.5 L'opérateur schrödinger libre

Dans le chapitre 1 nous avons vu que les espaces Hilbert correspondre à une particule dans $\mathbb{R}^3$ est $L^2(\mathbb{R}^3)$. et Plus généralement, les espaces Hilbert pour les particules $\mathbb{R}^d$ dans est $L^2(\mathbb{R}^n)$, $n = Nd$. Le non relativistic correspondant opérateur Hamilton, si les particules ne réagissent pas réciproquement, est donné par :

$$H_0 = -\triangle$$

Soit $\triangle$ est l'opérateur Laplace

$$\triangle = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$$

Ici nous avons choisi des unités tel que tout les constantes physiques pertinentes disparaissent; c'est, $h = 1$ et la masse des particules est égal à $m = \frac{1}{2}$ quelques auteurs préfèrent utiliser $m = 1$; c'est

$$H_0 = -\frac{1}{2}\triangle$$

.

Notre première tâche est trouver un bon domaine tel que H_0 est opérateur du moi auto-adjoint.

Par Lamme (2.4.1) nous avons cela

$$-\triangle\psi(x) = (\widehat{p^2\hat{\psi}(p)})(x), \qquad \psi \in H^2(\mathbb{R}^n)$$

alors l'opérateur

$$H_0\psi = -\triangle\psi, \quad \mathcal{D}(H_0) = H^2(\mathbb{R}^n)$$

est équivalent de l'unitaire à l'opérateur de la multiplication maximalement défini

$$(\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^{-1})\varphi(\xi) = \xi^2\varphi(\xi), \qquad \mathcal{D}(\xi^2) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) | \xi^2 \quad \varphi(\xi) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$$

Théorème 2.5.1

L'opérateur Schrőddinger libre H_0 est auto- adjoint et son spectre est caractérisé par

$$\sigma(H_0) = \sigma_{ac}(H_0) = [0, \infty] \qquad \sigma_{sc}(H_0) = \sigma_{pp}(H_0) = \emptyset$$

Preuve.

Il suffit pour montrer que $d\mu\psi$est purement absolument continu pour chaque ψ . En premierment observez cela

$$\langle\psi, R_{H_0}(z)\psi\rangle = \left\langle\widehat{\psi}, R_{p^2}(z)\widehat{\psi}\right\rangle = \int_{S^{n-1}} \frac{\left|\widehat{\psi}(p)\right|^2}{p^2 - z} d^n p = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{r^2 - a} d\widetilde{\mu}_\varphi(r),$$

alors que:

$$d\widetilde{\mu}_\varphi(r) = \chi_{[0,\infty)}(r) r^{n-1} (\int_{S^{n-1}} \left|\widehat{\psi}(e\ \omega)^2 d^{n-1}\omega\right| dr.$$

alors , nous avons après un changement de coordonnées, nous avons:

$$\langle\psi, R_{H_0}(z)\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\lambda - z} d\mu_\psi(\lambda).$$

alors que:

$$d\mu_\psi(\lambda) = \frac{1}{2}\chi_{[0,\infty)}(\lambda)\lambda^{n-1}(\int_{S^{n-1}} \left|\widehat{\psi}(\sqrt{\lambda}\omega)^2 d^{n-1}\omega\right| d\lambda.$$

dimontre la théorem

Finalement, nous notons que les fonctions lisses d'une manière compacte supportées sont essentiel pour H_0. ■

Chapitre 3

L'opérateur de schrödinger avec potentiel , Théorème de perturbation:

L'objet de ce chapitre est de répondre aux questions suivantes :

Si $T = -\triangle$est un auto-adjoint, est-il possible de donner des conditions sur V ,Est-il possible de comparer les spectres essentiels de T et $T+V$?

Dans le cas des opérateurs borné, on a vu que si V est T-compact ou T-bornés, T et $T+V$ ont même spectre essentiel

3.1 Theorémè de kato-rellich

Définition 3.1.1

Soient Tet A deux opérateurs à domaine dense. A est T-borné si les conditions suivantes sont réalisées :

1.$D(T) \subset D(A)$

2.$\exists\ a, b \in \mathbb{R}, \forall u \in D(T), \|Au\| \leq a\|Tu\| + b\|u\|$

La borne inférieure des a convenables est la borne relative de A (par rapport à T).

Si cette borne relative est nulle, A infiniment petit par rapport à Tet on écrit :$A << T$.

Remarque 3.1.1

A est T-borné si et seulement si est continu de $D(T)$, muni de la norme du graphe de T, dans H, ou encore, dans le cas où T est auto-adjoint, si $A(T+i)^{-1}$est un opérateur borné so A est borné,si A est borné, il est T-borné pour tout T, avec borne relative nulle.

Lacondition 2 est équivalente à la suivante, souvent plus facile à vérifier:

$$\exists a', b' \in \mathbb{R}, \forall u \in D(T), \|Au\|^2 \leq a'^2 \|Tu\|^2 + b^2 \|u\|^2 \tag{3.1.1}$$

borne inférieure des a'est la même que celle des a.

Si ces conditions sont vérifiées sur un cœur de T, elles le sont .sur $D(T)$.

Preuve.

Si $a\prime$ et $b\prime$ vérifient (3.1.1) alors pour tout ils vérifient (2)

Si a et b vérifient (3.1.1)alors pour tout $\varepsilon > 0$.

$$a'^2 = (1+\varepsilon)a^2, b'^2 = (1+\varepsilon^{-1})b^2 \tag{3.1.2}$$

vérifient (3.1.2)

La seconde affirmation est évidente. ■

Proposition 3.1.1 ***(théorème de kato-rellich)***

soit T un opérateur auto-adjoint, et A un opérateur symétrique T-borné, de borne relative $a < 1$.

Alors $T + A$ est auto-adjoint sur $D(T)$, et essentiellement auto-adjoint sur tout cœur de T.

Si T est semi-borné intérieurement, $T + A$ l'est aussi.

Preuve.

On utilise le critère de la proposition (1.11.1) : il suffit de trouver un réel $\alpha > 0$ tel que $T + A \pm i\alpha$ soit surjectif.

Ce sera le cas (pour le signe +)si $I + C$ est inversible, il suffit de montrer que C est un opérateur borné de norme strictement inférieure à 1 pour α convenable.

Puisque T est auto-adjoint, on a pour tout $u \in D(T)$:

$$\|(T+i\alpha)u\|^2 = \|TU\|^2 = \alpha^2 \|u\|^2$$

En appliquant cette égalité à $u = (T + i\alpha)^{-1}v$, on obtient

$$\left\| T(T + i\alpha)^{-1} \right\| \leq 1, \left\| (T + i\alpha)^{-1} \right\| \leq 1/\alpha$$

En reportant dans l'inégalité exprimant que A est T- borné, on obtient :

$$A(T + i\alpha)^{-1}v \leq a \left\| T(T + i\alpha)^{-1}v \right\| + b \left\| (T + i\alpha)^{-1}v \right\| \leq (a + \frac{b}{\alpha}) \left\| v \right\|$$

Puisque $a < 1$,il suffit de choisir α assez grand pour conclura .

Soit D_0 un coeur de T. L'inégalité entre A et T montre que la fermeture du graphe de (T, D_0), c'est-à-dire celui de $(T, D(T))$, est contenue dans la fermeture de celui de $(A+T, D_0)$ ce qui prouve que $A + T$ est essentiellement auto-adjoint sur le cœur D_0de T.

Montrons la dernière affirmation dans le cas où $T \geq 0$. $A + T - t$ est inversible pour t assez négatif Suivant la preuve précédente, on vérifie, en utilisant que $(T - t)$ est inversible pur $t < 0$, que pour $t < -\frac{b}{1-a}$ l'opérateur $A(T-t)^{-1}$est de norme < 1,et qu'alors $A+T-t$ est inversible. ■

3.2 Théorème de weyl

Définition 3.2.1

soint Tet A deux opérateurs fermés de l'espace de Hilbert H. A est relativement compact par rapport à T. ou T-compact si les conditions suivantes sont réalisées

1. $D(T) \subset D(A)$.

2.A est un opérateur compact de $D(T)$ muni de la norme du graphe de T à valeurs dans H

Remarque 3.2.1

A est T-compact si et seulement si pour un λdans l'ensemble résolvant de T, l'opérateur borné $A(T - \lambda)^{-1}$est compact.

Cette compaccité est alors vrais pour tout λ dans l'ensemble résolvant de T.

tout opérateur T-compact est T-borné.

En fait tout opérateur T-compact est infiniment petit par rapport à T.

Proposition 3.2.1

Soit T un opérateur fermé, et T-compact alors:

$$\forall \varepsilon, \exists u \in D(T), \|Au\| \leq \varepsilon \|Tu\| + C \|u\| \tag{3.2.1}$$

Preuve.

si la conclusion était fausse, il existerait $a > 0$ et une suite $u_n \in D(T)$ tels que:

$$\|Tu_n\| = 1, \|Au_n\| \geq a + n \|u_n\| \tag{3.2.2}$$

mais A est tout d'abord T-borné.

$$\exists C > 0. \forall u \in D(T), \|Au\| \leq (\|Tu\| + \|u\|) \tag{3.2.3}$$

d'où:

$$a + n \|u_n\| \leq \|Au_n\| \leq C(1 + \|u_n\|) \tag{3.2.4}$$

Il en résulte que $u_n \longrightarrow 0$, et qu'alors $u_n$est bornée dans $D(T)$. puisque A est T-compact.

Ayons possède une sous-suite convergente, forcément vers 0 puisque A est fermé et $u_n \to 0$.

ceci contredit $\|Au_n\| \geq a$. ■

Corollaire 3.2.1

si T est auto-adjoint et si A est symétrique et T-compact, alors $T + A$ est auto-adjoint sur $D(T)$, et essentiellement auto-adjoint sur tout coeur de T.

Preuve.

Il suffit d' le théorème de kato-Rellich ■

Proposition 3.2.2 ***(Théorème de Weyl)***

Si T est auto-adjoint et si A est symétrique et T-compact, alors T et $T + A$ ont même spectre essentiel

Preuve.

Soit u_n une suite singulière pour T en proposition () précédent. Puisque $(T-\lambda)u_n \longrightarrow 0$ et que $u_n$converge faiblement vers 0, u_n converge faiblement vers 0 dans $D(T)$ muni de la norme du graphe. Puisque A est T-compact, la suite Au_n converge vers 0 , donc $(T+A-\lambda)u_n \longrightarrow 0$, et u_n est singulière en λ pour $T+A$.

Dans le cas où $H = L^2(\mathbb{R}^d)$, il existe une caractérisation relativement commue dans la pratique des opérateurs T-compact.

La définition suivante n'est peut-être pas usuelle, mais facilite l'énoncé du résultat . ∎

Définition 3.2.2

Soit $(T, D(T))$ un opérateur auto adjoint dans $L^2(\mathbb{R}^d)$.et A un opérateur fermé. A est T-négligeable à l'infini si A est infiniment petit par rapport à T et si de plus, en notant $\chi_{B(0,R)}$ la fonction indicatrice de la boule de centre 0 et rayon R :

$$\forall \varepsilon > 0, \exists R, \forall u \in D(T) : (u\chi_{B(0,R)} = 0pp) \Longrightarrow (\|Au\| \leq \varepsilon(\|Tu\| + \|u\|))$$

Proposition 3.2.3

Si $V \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $-\Delta + V$ est auto-adjoint sur H^2, et son spectre essentiel est $[0, \infty[$.

Preuve.

Il résulte en effet de ce qui précède que la multiplication par V est Δ-compacte.

La fin de ce chapitre est consacrée à une étude plus précise de la borne inférieure du spectre essentiel pour des opérateurs de Schrôdinger sur R^d. ∎

3.3 Théorème de persson:

On utilisera le lemme suivant relatif au laplacien Δ de $\mathbb{R}^d$:

Lemme 3.3.1

Soit χ_B la fonction caractéristique d'une partie bornée de $\mathbb{R}^d$. La multiplication par χ_B est $-\Delta$compacte et aussi $(-\Delta)^{1/2}$compacte.

Preuve.

Le premier point résulte par régularisation Posons $T^* = \chi_B(i+(-\Delta)^{1/2})^{-1}$, en sorte que $T^*T = \chi_B\ (1-\Delta)^{-1}$ est compact par le premier point L'inégalité :

$$\|Tu\|^2 \leq \|u\|\,\|T^*Tu\|$$

prouve que l'image par T d'une suite faiblement convergente vers 0 est une suite convergente vers 0 en norme (car une suite faiblement convergente est bornée, et T^*T compact), donc que T est compact ■

Proposition 3.3.1

Soit $H = -\Delta + V$ où $V \geq 0$ est une fonction localement intégrable. La multiplication par χ_B fonction caractéristique d'une partie bornée de $\mathbb{R}^d$est H-compacte.

Preuve. voi[7] ■

Proposition 3.3.2

Soit $V \geq 0$ appartenant à $L^2_{loc}(\mathbb{R}^d)$. L'opérateur $-\Delta + V$ est essentiellement auto-adjoint à partir de C_0^∞.

Preuve.

Soit $T = -\Delta + V$ défini sur C_0^∞. $\overline{T}$ est fermé positif, ses indices de défaut sont donc égaux, et il est auto-adjoint si et seulement si ils sont nuls . Il suffit donc de montrer que le noyau de $T^* + 1$ est réduit à la fonction nulle. Mais puisque T a pour domaine :

$$(T^* + 1)u = 0 \Longleftrightarrow (-\Delta + V + 1)u = 0$$

où le laplacien est calculé au sens des distributions. Si $u \in L^2$ vérifie cette égalité, alors $\Delta u = Vu + u$ appartient à L^1_{loc} d'après l'hypothèse sur V. On déduit alors de l'inégalité de Kato et de la positivité de V que :

$$\Delta\,|u| \geq \mathrm{Re}(sgn(u)\Delta u) = \mathrm{Re}(sgn(u)(Vu+u)) = (V+1)\,|u|$$

d'où

$$\Delta\,|u| \geq 0$$

Si $\Delta |u|$ était dans le domaine du laplacien, on aurait alors $\langle \Delta |u|, |u| \rangle \geq 0$, mais cette quantité est négative ou nulle par positivité de $-\Delta$. Il en résulterait $u = 0$.

On se ramène à ce cas par régularisation avec une suite régularisante φ_n construite à partir d'une fonction $0 \leq \varphi \leq 1$ de C_0^∞.

Posons $u_n = |u| * \varphi_n$. Un est dans le domaine de A, puisque $\Delta u_n = |u| * \Delta\varphi_n$.

Mais on a aussi : $\Delta u_n = |u| * \Delta\varphi_n \geq 0$. le raisonnement précédent montre que $u_n = 0$, donc $u = 0$.

Si $V \geq 0$, la théorie des formes quadratiques permet de définir l'extension de Fricdrichs de $-\Delta + V$. Le domaine de cet opérateur auto-adjoint peut-être précisé . ■

Conclusion

Dans ce mémoire , on a exposé la théorie spectral de opérateur de schrödinger qui est un opérateur auto-adjoint agissant sur un espace de Hilbert , J'ai défini une Notion générale et les caractéristiques de ce opérateur .

Et j'ai défini l'équation et l'opérateur de schrödinger qui est soit libre ou avec potentiel, le premier écrit sous forme $Tf = -\triangle$, quand est un opérateur fermé et auto-adjoint se résulte le spectre essentiel $= [0, \infty]$.

Et la deuxième avec potentiel écrit sous forme $Tf = -\triangle + V$, j'ai suivi la perturbation comme méthode pour étudier la stabilité de spectre, L'énergie potentiel V doit être $\triangle -$ compact ou $\triangle$-bornés .

Bibliographie

[1] B. Buffoni; F.Genoud, Théorie spectrale et Évolution en mécanique quantique,2008.

[2] R.G.Cooke,Linear operators Spectral theory and some other application,london,1953

[3] L. Debnath et P. Mikusinski, Hilbert spaces with applications, Orlando, 1998

[4] J. Feldman,spectral theory example, université de la colombie-britannique, canada, 15 octobre 2012

[5] S.Goldberg,Unbounded linear operators theory and application,1966

[6] A.Guichardet,INTEGRATION ANALYSE HILBERTIENNE,PARIS,1989

[7] P.Lévy-Bruhl,Introduction a la theorie spectrale,paris,2003

[8] M. H. Mortad, The sum of tow unbounded linear operators,Université d'oran, 2012.

[9] M. Nadir, Cours d'analyse fonctionnelle, Université de M'sila, 2004.

[10] Y.Pequignot,Théorie spectrale et évolution en mécanique quantique,École Polythechnique Fédérale de Lausanne,2008

[11] K. Schmudgen, Unbounded Self-adjoint Operators on Hilbert Spaces, USA, 2001

[12] susanne,simon et jakob,Mathematical Methods in Quantum Mechanics With Applications to Schrödinger Operators,ammerican,2009.

[13] M. THAMBAN NAIR,LINEAR OPEATOR EQUATIONS,India,2009

[14] K.Tosio ,Perturbation Theory for Linear Operators,New York,1980