Examen de M2 ANEDP (2016-17)

Théorie spectrale et méthodes variationnelles

(Éric Cancès & Mathieu Lewin)

Avril 2017

Les notes de cours sont autorisées. Il sera tenu compte de la rédaction, qui doit être concise mais précise.

L'objectif de ce problème est d'étudier le spectre des opérateurs de Schrödinger périodiques en dimension $d = 1$, c'est-à-dire sous la forme

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{1}$$

où V est une fonction 1-périodique sur $\mathbb{R}$. Nous utiliserons la théorie de Bloch-Floquet vue en cours et montrerons que le spectre de bandes de H possède des propriétés spécifiques à la dimension 1, qui sont résumées dans la figure 1 ci-dessous. Nous montrerons en particulier que l'opérateur

$$\tilde{H}_\theta = \left(-i\frac{d}{dx} + \theta\right)^2 + V(x) \quad \text{défini sur } H^2_{\rm per}(]0,1[),$$

a des valeurs propres $\{\lambda_n(\theta)\}_{n\geqslant 1}$ qui sont paires sur $[-\pi,\pi]$, et qui sont alternativement croissantes et décroissantes, c'est-à-dire que les λ_n sont croissantes sur $[0,\pi]$ lorsque n est impair et décroissantes lorsque n est pair. Nous montrerons également qu'elles ne peuvent pas se croiser sur $]0,\pi[$, ce qui implique que les bandes de l'opérateur H ne se superposent pas. Elles peuvent par contre coincider en $\theta \in \{0,\pi\}$. Dans la majorité du problème, il sera plus commode d'utiliser les conditions de Born-von Karman $u(0) = e^{-i\theta}u(1)$ et $u'(0) = e^{-i\theta}u'(1)$, ce qui transforme $\tilde{H}_\theta$ en

$$H_\theta = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

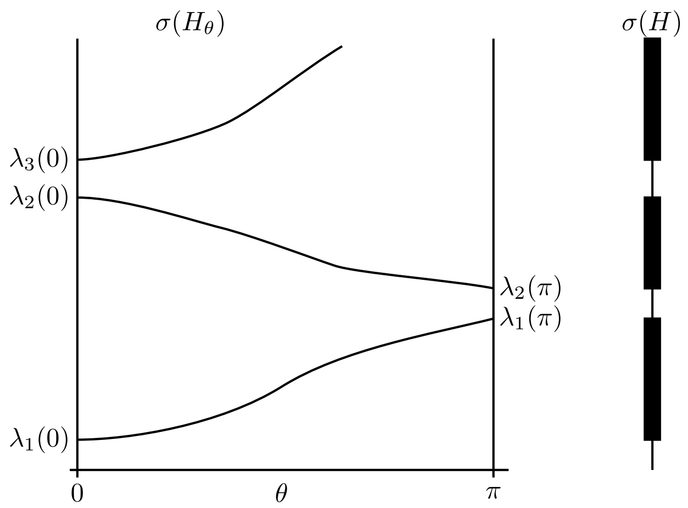

Figure 1: Forme du spectre de H_θ en fonction de θ et conséquence sur celui de H.

Partie 1. L'opérateur H sur tout $\mathbb{R}$.

Dans tout le problème on suppose pour simplifier que la fonction V est continue sur $\mathbb{R}$ et 1-périodique, c'est-à-dire que $V(x+1) = V(x)$ pour tout $x \in \mathbb{R}$.

Question 1-a. En citant un résultat du cours, montrer que l'opérateur H défini en (1) est auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R})$, de domaine $H^2(\mathbb{R})$.

Question 1-b. Montrer que le spectre de H est minoré, c'est-à-dire que $\sigma(H) \subset [C, \infty)$.

Partie 2. Laplacien avec condition de Born-von Karman.

Soit $\theta \in [-\pi, \pi]$. On commence par étudier le cas de $V = 0$ et on définit les deux opérateurs

$$\begin{cases} L_\theta = -\dfrac{d^2}{dx^2} \\ D(L_\theta) = H^2_{\mathrm{BvK},\theta}(]0,1[) = \left\{ u \in H^2(]0,1[) \ : \ u(0) = e^{-i\theta}u(1), \ u'(0) = e^{-i\theta}u'(1) \right\}, \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} \tilde{L}_\theta = \left(-i\dfrac{d}{dx} + \theta\right)^2 = -\dfrac{d^2}{dx^2} - 2i\theta\dfrac{d}{dx} + \theta^2 \\ D(\tilde{L}_\theta) = H^2_{\mathrm{per}}(]0,1[) = \left\{ u \in H^2(]0,1[) \ : \ u(0) = u(1), \ u'(0) = u'(1) \right\}. \end{cases}$$

On rappelle que ces deux opérateurs sont unitairement équivalents : on a

$$L_\theta = U_\theta \tilde{L}_\theta U_\theta^*$$

où U_θ est l'opérateur unitaire consistant à multiplier par $e^{i\theta x}$, c'est-à-dire $(U_\theta f)(x) = e^{i\theta x} f(x)$.

Question 2-a. En utilisant les séries de Fourier, rappeler brièvement pourquoi L_θ et $\tilde{L}_\theta$ sont auto-adjoints sur leur domaine. Quel est leur spectre ? Quelles sont les fonctions propres correspondantes ?

Question 2-b. Soit $a > 0$ et $\theta \in [-\pi, \pi]$. Soit $G_{a,\theta}$ la fonction 1-périodique définie par

$$G_{a,\theta}(x) = \frac{e^{ax - i\theta x}}{2a(e^{a-i\theta} - 1)} + \frac{e^{a(1-x)+i\theta(1-x)}}{2a(e^{a+i\theta} - 1)}, \qquad \text{pour } x \in [0,1], \tag{2}$$

et étendue par périodicité à tout $\mathbb{R}$. Montrer que $G \in H^1_{\mathrm{per}}(]0,1[)$ et que l'on a, au sens des distributions,

$$-\left(-i\frac{d}{dx} + \theta\right)^2 G_{a,\theta} + a^2 G_{a,\theta} = \sum_{z \in \mathbb{Z}} \delta_z.$$

En déduire que pour tout $u \in L^2(]0,1[)$,

$$\left((\tilde{L}_\theta + a^2)^{-1} u\right)(x) = \int_0^1 G_{a,\theta}(x-y) u(y)\, dy. \tag{3}$$

Question 2-c. Montrer que $\tilde{L}_0 = L_0$ a une résolvante qui préserve la positivité, c'est-à-dire que si $u \in L^2(]0,1[)$ et $u(x) \geqslant 0$, alors $\left((L_0 + a^2)^{-1} u\right)(x) \geqslant 0$ et même que $\left((L_0 + a^2)^{-1} u\right)(x) > 0$ si $u \neq 0$.

Partie 3. Non-dégénérescence des valeurs propres de l'opérateur H_θ.

On réintroduit maintenant le potentiel V, une fonction continue et 1-périodique sur $\mathbb{R}$. Pour $\theta \in [-\pi, \pi]$, on définit l'opérateur

$$H_\theta = L_\theta + V(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

sur le même domaine que L_θ :

$$D(H_\theta) = H^2_{\mathrm{BvK},\theta}(]0,1[) = \left\{u \in H^2(]0,1[) \ : \ u(0) = e^{-i\theta}u(1),\ u'(0) = e^{-i\theta}u'(1)\right\}.$$

Un opérateur $\tilde{H}_\theta$ défini de façon similaire à partir de $\tilde{L}_\theta$ interviendra plus tard.

Question 3-a. Montrer que H_θ est auto-adjoint, borné inférieurement et à résolvante compacte.

Dans la suite on appelle $\lambda_n(\theta)$ les valeurs propres ordonnées de H_θ (comptées avec multiplicité) et $u_n(\theta, x)$ une base orthonormée de fonctions propres correspondantes.

Question 3-b. Montrer que H_θ et $H_{-\theta}$ ont le même spectre, c'est-à-dire que $\lambda_n(\theta) = \lambda_n(-\theta)$, avec la relation $u_n(-\theta, x) = \overline{u_n(\theta, x)}$.

Soit maintenant λ un réel quelconque. On rappelle que, d'après le théorème de Cauchy-Lipschitz, les solutions de l'équation différentielle ordinaire

$$-v''(x) + V(x)v(x) = \lambda v(x). \tag{4}$$

sur $[0,1]$ forment un espace vectoriel de dimension 2, paramétré par les valeurs de $v(0)$ et $v'(0)$. On note $v_\lambda(x)$ l'unique solution satisfaisant

$$v_\lambda(0) = 1 \quad \text{et} \quad v'_\lambda(0) = 0$$

et w_λ l'unique solution satisfaisant

$$w_\lambda(0) = 0 \quad \text{et} \quad w'_\lambda(0) = 1.$$

On notera que v_λ et w_λ sont deux fonctions à valeurs réelles. On définit alors la matrice

$$M(\lambda) = \begin{pmatrix} v_\lambda(1) & w_\lambda(1) \\ v'_\lambda(1) & w'_\lambda(1) \end{pmatrix}$$

qui contient les valeurs au point $x = 1$ de ces deux fonctions.

Question 3-c. Montrer que le Wronskien est constant

$$\det \begin{pmatrix} v_\lambda(x) & w_\lambda(x) \\ v'_\lambda(x) & w'_\lambda(x) \end{pmatrix} = 1, \qquad \forall x \in [0,1],$$

et en déduire que $\det M(\lambda) = 1$.

Question 3-d. Montrer que λ est une valeur propre de H_θ et de $H_{-\theta}$ si et seulement si $e^{i\theta}$ et $e^{-i\theta}$ sont des valeurs propres de la matrice $M(\lambda)$. Exprimer la solution correspondante $u_n(\pm\theta, x)$ en fonction des vecteurs propres de la matrice $M(\lambda)$.

Question 3-e. Montrer que si $\theta \in]0,\pi[$, alors les valeurs propres $\lambda_n(\theta)$ sont toutes simples. Ainsi, on a $\lambda_n(\theta) < \lambda_{n+1}(\theta)$ pour tout $\theta \in]0,\pi[$.

Question 3-f. Montrer que $\lambda_1(0)$ (la première valeur propre pour $\theta = 0$) est simple et que sa fonction propre est strictement positive et paire. On pourra utiliser l'expression de $(L_0 + a^2)^{-1}$ vue à l'équation (3).

Question 3-g Donner un exemple de potentiel V très simple pour lequel $\lambda_2(0) = \lambda_3(0)$.

Question 3-h. Pour cette question et la suivante, il est utile d'introduire, provisoirement, l'opérateur

$$\tilde{H}_\theta = \tilde{L}_\theta + V(x) = -\frac{d^2}{dx^2} - 2i\theta\frac{d}{dx} + \theta^2 + V(x)$$

défini sur le même domaine que $\tilde{L}_\theta$:

$$D(\tilde{H}_\theta) = H^2_{\rm per}(]0,1[) = \left\{u \in H^2(]0,1[) \ : \ u(0) = u(1),\ u'(0) = u'(1)\right\}.$$

On rappelle que $H_\theta = U_\theta \tilde{H}_\theta U_\theta^*$. Montrer que

$$\lambda_1(\theta) = \min_{\substack{u \in H^1_{\rm per}(]0,1[) \\ \int_0^1 |u|^2 = 1}} \int_0^1 \left(\left|-iu'(x) + \theta u(x)\right|^2 + V(x)|u(x)|^2\right) dx.$$

Expliquer rapidement pourquoi $\theta \in [-\pi,\pi] \mapsto \lambda_1(\theta)$ est une fonction continue.

Question 3-i. Soit u une fonction quelconque dans $H^1_{\rm per}(]0,1[)$, écrite sous la forme $u = u_1 + iu_2$ avec u_1 et u_2 à valeurs réelles. En optimisant par rapport à $\theta \in \mathbb{R}$, montrer que

$$\left| -iu'(x) + \theta u(x)\right|^2 \geqslant \left| |u|'(x)\right|^2$$

presque partout. En déduire que $\lambda_1(\theta) \geqslant \lambda_1(0)$ pour tout $\theta \in [-\pi,\pi]$.

Partie 4. Monotonie des valeurs propres de l'opérateur H_θ.

Question 4-a. Montrer que λ est une valeur propre de H_θ si et seulement si

$$\mathrm{Tr}\ M(\lambda) = 2\cos\theta.$$

Dans la suite on note $\varphi(\lambda) := \mathrm{Tr}\ M(\lambda)$ et on admettra que φ est une fonction analytique de λ (ce qui suit d'une version analytique du théorème de Cauchy-Lipschitz).

Question 4-b. Montrer que $\varphi(\lambda) > 2$ pour tout $\lambda < \lambda_1(0)$.

Question 4-c. En utilisant que

$$\arccos\left(\frac{\varphi(\lambda_1(\theta))}{2}\right) = \theta, \qquad \text{pour tout } \theta \in [0,\pi],$$

montrer que $\lambda_1(\theta)$ est croissante sur $[0,\pi]$ et que φ est décroissante sur $[\lambda_1(0), \lambda_1(\pi)]$.

Question 4-d. On suppose pour simplifier que $\varphi'(\lambda_1(\pi)) < 0$. Montrer que $\lambda_2(\pi) > \lambda_1(\pi)$, puis que $\lambda_2(\theta)$ est décroissante sur $[0,\pi]$ et que φ est croissante sur $[\lambda_2(0), \lambda_2(\pi)]$.

Question 4-e. Conclure.