Théorie spectrale et méthodes variationnelles
M2 Mathématiques et Applications
Spécialité Mathématiques de la Modélisation

DM à rendre au plus tard le 5 juin 2020 à 18h00

Les réponses aux questions de la Partie I sont à rédiger en LaTeX

La notation tiendra fortement compte de la précision des arguments.

Notations, rappels et compléments.

1. **Espaces fonctionnels.** Dans cet énoncé, les espaces fonctionnels $C^k(\mathbb{R}^d)$, $L^p(\mathbb{R}^d)$, $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ (espace de Schwartz), etc. sont supposés composés de fonctions à valeurs complexes. Si les fonctions considérées sont à valeurs réelles, on utilisera la notation $C^k(\mathbb{R}^d;\mathbb{R})$, $L^p(\mathbb{R}^d;\mathbb{R})$, $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d;\mathbb{R})$, etc.

2. **Oscillateur harmonique quantique unidimensionnel.** L'opérateur $H_{\mathrm{oh},1}$ sur $L^2(\mathbb{R})$ défini par

$$D(H_{\mathrm{oh},1}) := \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}) \mid \ -\frac{d^2u}{dy^2}(y) + y^2 u(y) \in L^2(\mathbb{R}) \right\},$$
$$\forall u \in D(H_{\mathrm{oh},1}), \quad (H_{\mathrm{oh},1\mathrm{d}}u)(y) := -\frac{1}{2}\frac{d^2u}{dy^2}(y) + \frac{1}{2}y^2 u(y),$$

est auto-adjoint et il existe une suite $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de polynômes avec $p_0(y) = \pi^{-1/4}$, $p_1(y) = 4\pi^{-1/4}y$ et $\deg(p_n) = n$ pour tout $n \in \mathbb{N}$, telle que les fonctions $\phi_n(y) = p_n(y)e^{-y^2/2}$ vérifient les propriétés suivantes :

   (a) $(\phi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ forme une base hilbertienne de $L^2(\mathbb{R})$;

   (b) pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\phi_n \in D(H_{\mathrm{oh},1})$ et $H_{\mathrm{oh},1}\phi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\phi_n$.

3. **Opérateurs essentiellement auto-adjoints et cœurs.** Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert, et A un opérateur symétrique sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(A)$. On dit que A est essentiellement auto-adjoint s'il possède une unique extension auto-adjointe (celle-ci est alors donnée par $\overline{A} = A^*$). On dit qu'un sous espace vectoriel $D \subset D(A)$ est un cœur pour A si l'opérateur symétrique A_D défini par $D(A_D) = D$ et $A_D u = \overline{A}u$ pour tout $u \in D$ admet $\overline{A}$ comme unique extension auto-adjointe.

4. **Produits tensoriels d'espaces L^2.** Soit Ω_j un ouvert de $\mathbb{R}^{d_j}$ avec $d_j \geqslant 1$ pour $1 \leqslant j \leqslant J$. Si $(\phi_{j,n})_{n\in\mathbb{N}}$ est une base hilbertienne de $L^2(\Omega_j)$ pour tout $1 \leqslant j \leqslant J$,

alors $(\phi_{1,n_1} \otimes \cdots \otimes \phi_{J,n_J})_{(n_1,\cdots,n_J)\in\mathbb{N}^J}$, où

$$(\phi_{1,n_1} \otimes \cdots \otimes \phi_{J,n_J})(y) = \prod_{j=1}^{J} \phi_{j,n_j}(y_j) \qquad \text{pour } y = (y_1, \cdots, y_J) \in \Omega_1 \times \cdots \times \Omega_J,$$

est une base hilbertienne de l'espace $L^2(\Omega_1) \otimes \cdots \otimes L^2(\Omega_J) \equiv L^2(\Omega_1 \times \cdots \times \Omega_J)$.

Partie I : oscillateur harmonique quantique multi-dimensionnel

On considère l'opérateur $H_{\mathrm{oh,d}}$ sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ défini par

$$D(H_{\mathrm{oh,d}}) := \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}^d) \mid \ -\Delta u(x) + |x|^2 u(x) \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\},$$
$$\forall u \in D(H_{\mathrm{oh,d}}), \quad (H_{\mathrm{oh,d}} u)(x) := -\frac{1}{2}\Delta u(x) + \frac{1}{2}|x|^2 u(x),$$

où $|x| = (x_1^2 + \cdots + x_d^2)^{1/2}$ désigne la norme euclidienne du vecteur $x = (x_1, \cdots, x_d)^T \in \mathbb{R}^d$.

1a) Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert complexe, $(e_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une base hilbertienne de $\mathcal{H}$, et $(\lambda_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite de réels. On considère l'opérateur A sur $\mathcal{H}$ défini par

$$D(A) = \left\{ u \in \mathcal{H} \mid \sum_{n\in\mathbb{N}} (1 + |\lambda_n|^2) |(e_n, u)_{\mathcal{H}}|^2 < \infty \right\}$$

et

$$\forall u \in D(A), \quad Au = \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n (e_n, u)_{\mathcal{H}} e_n.$$

Vérifier que A est un opérateur bien défini, à domaine dense, et symétrique.

1b) Montrer que l'opérateur A est auto-adjoint.

1c) Montrer que $\sigma(A) = \overline{\{\lambda_n,\, n \in \mathbb{N}\}}$.

1d) Montrer que l'espace vectoriel V des combinaisons linéaires finies des $(e_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est un cœur pour A (on rappelle que si A et B sont des opérateurs symétriques, $A^{**} = \overline{A}$, $\overline{A}^* = A^*$ et $A \subset B$ implique $B^* \subset A^*$).

1e) En utilisant les points 2 et 4 des "notations, rappels et compléments" ci-dessus, montrer qu'il existe une base hilbertienne de $L^2(\mathbb{R}^d)$ formée de fonctions propres de $H_{\mathrm{oh,d}}$.

1f) En utilisant les résultats des deux questions précédentes, montrer que $H_{\mathrm{oh,d}}$ est auto-adjoint, à résolvante compacte et que $H_{\mathrm{oh,d}} \geqslant \frac{d}{2}$ (*Indication : on pourra montrer que l'opérateur auto-adjoint H sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ défini comme à la question 1a à partir des fonctions propres et des valeurs propres de $H_{\mathrm{oh,d}}$ construites à la question 1b est à résolvante compacte et vérifie $H \geqslant \frac{d}{2}$, puis qu'il coïncide avec $H_{\mathrm{oh,d}}$ sur l'espace engendré par ces fonctions propres*).

1g) Préciser les spectres ponctuel, continu, discret, essentiel de $H_{\mathrm{oh,d}}$.

1h) Soit $d = 2$ et $\psi_0(x_1, x_2) = (1 + x_1 + 2x_2 + 3x_1x_2)e^{-(x_1^2+x_2^2)/2}$. Calculer explicitement $e^{-itH_{\mathrm{oh,2}}}\psi_0(x_1, x_2)$ pour tout $t \in \mathbb{R}$ (*indication : on utilisera pour cela la base $(\phi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de l'oscillateur harmonique unidimensionnel introduite au point 2 des "notations, rappels et compléments"*).

Partie II : un Hamiltonien de Stark

On admettra le résultat suivant.

Théorème 1. *Soit N un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(N)$ tel que $N \geqslant 1$. Soit A un opérateur symétrique de domaine $D(A)$ tel que*

- *$D(A)$ est un coeur pour N et il existe une constante $C \in \mathbb{R}_+$ telle que*
$$\forall u \in D(A), \quad \|Au\| \leqslant \alpha \|Nu\|; \tag{1}$$
- *il existe une constante $\alpha > 0$ telle que*
$$\forall u \in D(A), \quad |(Au, Nu) - (Nu, Au)| \leqslant \alpha \|N^{1/2}u\|^2. \tag{2}$$

Alors, A est essentiellement auto-adjoint.

Soit $V \in C^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ tel que $V \geqslant 0$ sur $\mathbb{R}^3$. On considère l'opérateur A sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ de domaine $D(A) = \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ défini par

$$\forall \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3), \quad (A\phi)(x) = -\frac{1}{2}\Delta\phi(x) + V(x)\phi(x) + x_1\phi(x),$$

où x_1 est la première composante du vecteur $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$.

2a) Montrer que A est un opérateur symétrique.

2b) Montrer que pour un certain choix de $D(N_0)$ que l'on précisera,

$$N_0 = -\frac{1}{2}\Delta + x_1 + \frac{1}{2}|x|^2$$

définit un opérateur auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ unitairement équivalent à $H_{\mathrm{oh},3} + c$ où $c \in \mathbb{R}$ est une constante que l'on explicitera. Quel est le spectre ponctuel de N_0 ? Quel est son spectre continu ? Montrer que N_0 est à résolvante compacte et que $N_0 \geqslant 1$.

2c) Montrer que pour un certain choix de $D(N)$ que l'on précisera

$$N = -\frac{1}{2}\Delta + V + x_1 + \frac{1}{2}|x|^2$$

définit un opérateur auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ vérifiant $N \geqslant 1$ et $N \geqslant \frac{1}{2}H_{\mathrm{oh},3} - 1$.

2d) Soit $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Etablir les résultats suivants

- pour tout $1 \leqslant j \leqslant 3$, $\operatorname{Re}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_j}, x_j\phi\right)_{L^2} = -\frac{1}{2}\|\phi\|_{L^2}^2$;
- pout tout $1 \leqslant j \leqslant 3$, $(A(x_j\phi), x_j\phi)_{L^2} = (A\phi, x_j^2\phi)_{L^2} - \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_j}, x_j\phi\right)_{L^2}$;
- $\|N\phi\|_{L^2}^2 = \|A\phi\|_{L^2}^2 + \sum_{j=1}^{3}(A(x_j\phi), x_j\phi)_{L^2} - \frac{3}{2}\|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{1}{4}\||x|^2\phi\|_{L^2}^2$, puis
$$\|N\phi\|_{L^2}^2 = \|A\phi\|_{L^2}^2 + \sum_{j=1}^{3}\left(\left(A + \frac{1}{4}|x|^2\right)(x_j\phi), x_j\phi\right)_{L^2} - \frac{3}{2}\|\phi\|_{L^2} ;$$

- $-i\left((A\phi, N\phi)_{L^2} - (N\phi, A\phi)_{L^2}\right) = \dfrac{1}{2}\left(((-\Delta + |x|^2)\phi, \phi)_{L^2} - ((-i\nabla + x)^2\phi, \phi)_{L^2}\right)$
$$\leqslant \frac{1}{2}\left((-\Delta + |x|^2)\phi, \phi\right)_{L^2}.$$

2e) Montrer que $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ est un cœur pour $H_{\mathrm{oh},3}$. En déduire que $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ est un cœur pour N_0, puis qu'il en est de même pour N.

2f) Soit $\omega > 0$ et $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Pour $\sigma > 0$, on pose $\psi_\sigma(x) = \sigma^{3/2}\psi(\sigma x)$. Calculer

$$\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi_\sigma|^2 + \frac{\omega^2}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |x|^2|\psi_\sigma(x)|^2\, dx$$

en fonction de ψ et de σ et en déduire que

$$\forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3), \quad \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi|^2 + \frac{1}{4}\int_{\mathbb{R}^3} |x|^2|\psi(x)|^2\, dx \geqslant \frac{3}{2\sqrt{2}}\|\psi\|^2_{L^2},$$

puis que

$$\forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3), \quad \left(\left(A + \frac{1}{4}|x|^2\right)\psi, \psi\right)_{L^2} \geqslant 0.$$

2g) Déduire du Théorème 1 et des résultats ci-dessus que A est essentiellement auto-adjoint. On notera $H_V := \overline{A} = A^*$ afin d'expliciter la dépendance de cet opérateur par rapport à V.

2h) On considère dans cette question le cas où $V = 0$. Montrer que pour tout $c \in \mathbb{R}$,

- $\lambda \in \sigma_{\mathrm{p}}(H_0) \Rightarrow \lambda + c \in \sigma_{\mathrm{p}}(H_0)$;
- $\lambda \in \sigma(H_0) \Rightarrow \lambda + c \in \sigma(H_0)$.

En déduire que $\sigma_{\mathrm{d}}(H_0) = \sigma_{\mathrm{p}}(H_0) = \varnothing$ et que $\sigma(H_0) = \sigma_{\mathrm{c}}(H_0) = \sigma_{\mathrm{ess}}(H_0) = \mathbb{R}$. *Indication : on utilisera le fait que le spectre ponctuel d'un opérateur auto-adjoint sur un espace de Hilbert séparable est au plus dénombrable.*

2i) En fait, $\sigma_{\mathrm{p}}(H_V) = \varnothing$ dès que le gradient de V vérifie une certaine condition à l'infini. La preuve de ce résultat étant technique, on va montrer un résultat plus faible en dimension 1. On se donne une fonction $v \in C^1(\mathbb{R};\mathbb{R})$ telle que $\limsup_{y\to-\infty} |v'(y)| < 1$, un réel λ et une fonction $\phi \in H^1(\mathbb{R})$ solution de l'équation

$$-\frac{1}{2}\phi''(y) + v(y)\phi(y) + y\phi(y) = \lambda\phi(y)$$

au sens des distributions. On veut montrer que $\phi = 0$.

- Montrer qu'on peut supposer sans perte de généralité que ϕ est à valeurs réelles.
- Montrer que $\phi \in C^3(\mathbb{R})$ puis que la fonction $G : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ définie par
$$G(y) = -\frac{1}{2}\phi'(y)^2 + (y + v(y) - \lambda)\phi(y)^2,$$
est croissante sur $(-\infty, -C]$ pour une certaine constante réelle C suffisamment grande.
- Montrer que la fonction $y \mapsto y^{-1}G(y)$ est dans $L^1((-\infty, -C])$. En déduire que G tend vers 0 en $-\infty$.
- Déduire des résultats précédents que $\phi = 0$ au voisinage de $-\infty$. Conclure.