

THESIS / THÈSE

MASTER EN SCIENCES MATHÉMATIQUES

États liés et bandes en théorie de Schroedinger à une dimension

Habay, Jean

Award date:
1975

Awarding institution:
Universite de Namur

[Link to publication](#)

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

FACULTES UNIVERSITAIRES N.D. DE LA PAIX

NAMUR

Année académique 1974-1975

ETATS LIES ET BANDES
EN THEORIE DE SCHROEDINGER
A UNE DIMENSION



LABORATOIRE
DE
PHYSIQUE MATHEMATIQUE
ET DE
PHYSIQUE DU SOLIDE

Mémoire présenté pour l'obtention
du Grade de Licencié en Sciences
Mathématiques
par

Jean HABAY

Promoteur

André RONVEAUX

FMB1/1975/6



20 4964
L95 3434961

RESUME

Des conditions nécessaires et des conditions suffisantes sont déterminées pour l'obtention du l^{er} et du n^{e} état lié (dans le cas où le potentiel est non périodique) ou de la l^{e} et de la n^{e} bande (potentiel périodique) en théorie de Schroedinger.

Des valeurs exactes du spectre de l'équation de Schroedinger sont trouvées dans le cas particulier où le potentiel est constitué de distributions Dirac.

PRELIMINAIRES

L'équation de Schroedinger, dans le cas d'une particule sous l'action d'un potentiel, est une équation différentielle linéaire du 2^è ordre avec conditions limites. Ce problème de Sturm - Liouville définit un spectre qui peut être discret (fini ou infini) ou continu.

Du point de vue de la physique, le spectre définit les niveaux d'énergie correspondant au potentiel choisi et les fonctions propres correspondent aux fonctions d'ondes caractérisant la probabilité de présence de la particule.

Nous étudions ici uniquement le spectre et non pas les fonctions propres. Le spectre seul peut en effet être caractérisé par une équation du premier ordre (équation de Riccati) tandis que la 2^è étape, recherche des fonctions propres, demande la résolution d'équation du 2^è ordre.

Ce travail consiste à exploiter la transformation de l'équation de Schroedinger unidimensionnelle en une équation de Riccati. Cette équation de Riccati sera appelée équation de phase [1] [2] [3]. Si le potentiel est non périodique, les solutions sont discrètes : on les appellera états liés; si le potentiel est périodique, les solutions occupent des portions continues de l'espace des fonctions : on parlera de bande.

Dans un premier temps, nous expliquons en détail la méthode employée aussi bien dans le cas non périodique que dans le cas périodique.

Dans le chapitre II, l'étude porte sur l'équation de Schroedinger avec comme potentiel 1, 2, 3 ... ou une suite de distributions delta. Ce cas est particulièrement inté-

ressant car les valeurs exactes des solutions peuvent être déterminées.

Dans le chapitre III, le potentiel choisi est non périodique. On donne alors une condition nécessaire et une condition suffisante à l'obtention du premier état lié et du n^{e} état lié.

Le dernier chapitre détermine les solutions de l'équation de Schroedinger à potentiel périodique. La théorie développée dans un travail parallèle "Counting the poles of the solution of a general Riccati equation"^[4] nous permet de donner une CN et une CS à l'obtention de la première et de de la n^{e} bande. Les résultats utilisés dans ce travail portent essentiellement sur l'équation de Schroedinger mais peuvent évidemment être transposés à l'étude abstraite des E.D. linéaires du 2^e ordre à coefficients périodiques (équ. de Hill). Cet aspect purement mathématique est parfois signalé dans ce travail mais est par contre développé dans une publication séparée ^[4] (53 pages)

INTRODUCTION

1) DEFINITION D'UN ETAT LIE (SPECTRE DISCRET)

Considérons l'équation de Schroedinger unidimensionnelle sous la forme générale :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

où

- | \hbar = constante de Planck / 2π
- | m = masse de la particule
- | $V(x)$ = potentiel
- | E = énergie
- | $\psi(x)$ = fonction d'onde

Nous travaillons dans un système d'unités tel que :

$$\hbar = 1 \text{ et } 2m = 1$$

L'équation s'écrit :

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + E\psi(x) = V(x) \psi(x) \quad (i)$$

Les conditions :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \bar{\psi}(x) dx < \infty \quad \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \bar{\psi} dx = 1 \right) \\ \psi, \bar{\psi} \text{ continues pour tout } x \end{array} \right. \quad (ii)$$

définissent un état lié

Un état lié est une solution de l'équation (i) avec conditions (ii), pour laquelle E est valeur propre et ψ la fonction propre associée.

Il est à remarquer que les potentiels considérés ici sont généralement de la forme $V(x) \leq 0$.

Appelons L l'opérateur $\frac{-d^2}{dx^2} + V(x)$ (iii)

(i) devient : $L \psi(x) = E \psi(x)$

$V(x)$ étant donné, le problème revient à déterminer les valeurs de E permises pour la valeur donnée du potentiel. En d'autres termes, il faut rechercher les valeurs propres de l'opérateur L .

Dans le cas où $V(x) = 0$ pour $|x| \geq R$
 ≤ 0 pour $|x| < R$

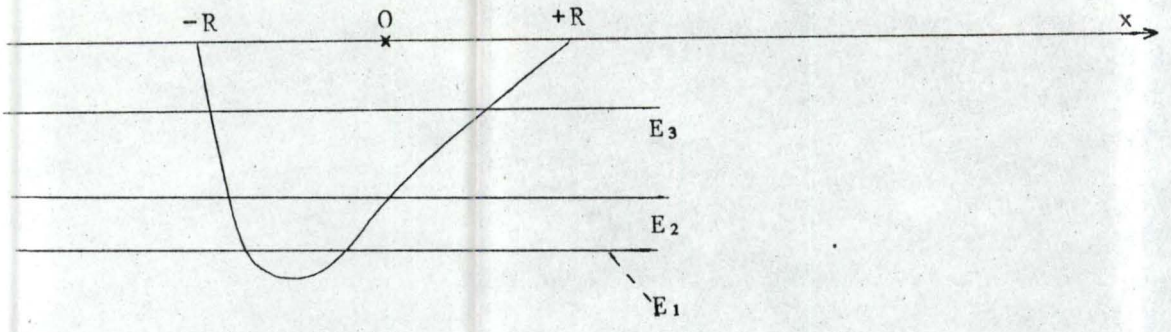
les valeurs de E sont discrètes, négatives et en nombre fini (voir figure 1)

2) SPECTRE DE BANDES

Lorsque le potentiel est périodique de période L sur $(-\infty, +\infty)$, les conditions (ii) sont à remplacer par :

$$\begin{cases} \psi(x) \text{ bornée pour tout } x \\ \psi, \psi' \text{ continues pour tout } x \end{cases}$$

Dans ce cas, le spectre de l'opérateur L consiste en une série de bandes séparées par des régions où l'énergie n'est pas permise (la solution n'étant pas bornée) - (voir fig.2)

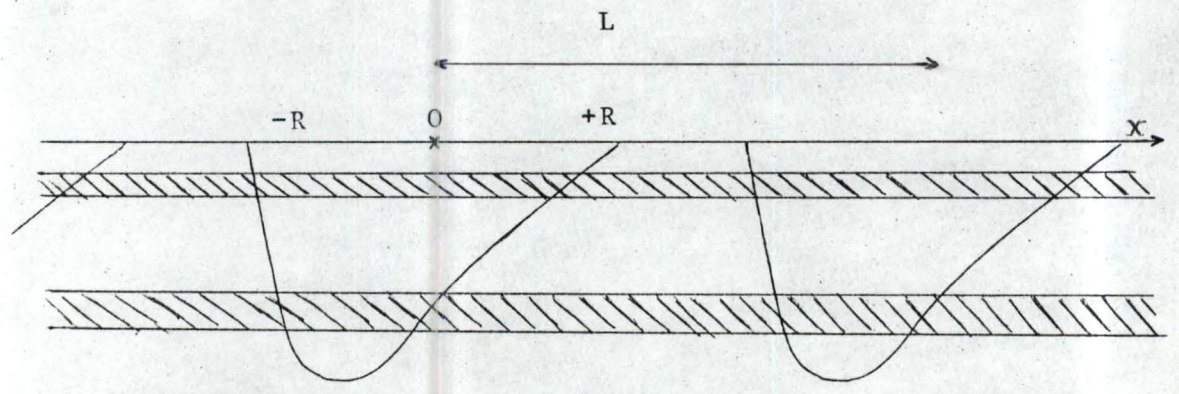


$$V(x) \leq 0 \quad |x| \leq R$$

$$V(x) = 0 \quad |x| > R$$

\exists valeurs discrètes de E
 (ici E_1, E_2, E_3)

figure 1



$V(x)$ périodique
 $V(x) \leq 0 \quad (-\infty, +\infty)$

\exists bandes de valeurs permises pour E
 (en hachuré sur le dessin)

figure 2

CHAPITRE I. : L'EQUATION DE PHASE

1. CONDITIONS AUX LIMITES NON PERIODIQUES

Soit à résoudre l'équation différentielle suivante :

$$\begin{aligned} (p(x) u'(x))' + q(x) u(x) &= V(x) u(x) \\ a \leq x < R & \end{aligned} \quad (1-1)$$

$$p \in C^1 ; q \text{ et } V \in C$$

Remarquons qu'on retrouve l'équation de Schroedinger (i) en prenant $p = 1$ et $q(x) = E(x)$

a) $V = 0$:

La solution générale de l'équation homogène s'écrit :

$$y = C_1 u_1(x) + C_2 u_2(x)$$

où les u_i sont les 2 solutions linéairement indépendantes de l'équation (1-1) lorsque $V = 0$

b) $V \neq 0$:

appliquons la méthode de variation des constantes, c'est-à-dire considérons les coefficients C_i comme variables. La solution s'écrit alors :

$$y = C_1(x) u_1(x) + C_2(x) u_2(x)$$

Posons $S(x) = \frac{C_2(x)}{C_1(x)}$ (1-2)

où S sera appelé "phase"

On peut alors aisément vérifier que la phase satisfait l'équation de Riccati [2] [3]

$$S'(x) = \frac{V(x)}{p(x)W(x)} (u_1(x) + S(x)u_2(x))^2 \quad (1-3)$$

où $W(x)$ est le Wronskien de u_1 et u_2 , c'est-à-dire

$$W = W[u_1, u_2] = u_1 u_2' - u_2 u_1'$$

L'équation(1-3) est appelée "équation de phase"

Les conditions limites imposées sur $u(x)$ peuvent se ramener aux conditions suivantes : (afin d'assurer l'intégrabilité de la solution - Voir remarque pp.:13)

$$C_2(a) = 0 \Rightarrow S(a) = 0$$

$$C_1(R) = 0 \Rightarrow S(R) = \infty$$

Un état lié est alors caractérisé par une solution de l'équation(1-3), dont les conditions limites se traduisent à présent par :

$$\begin{cases} S(a) = 0 \\ S(R) = \infty \end{cases}$$

Nous pouvons en déduire que chaque passage de S par l'infini correspond à un état lié, en théorie de Schroedinger (voir remarque pp. : 8)

Afin de caractériser ces pôles, effectuons la transformation homographique (T. H.)

$$U(x) = \frac{S(x)}{S(x) + \frac{u_1(x)}{u_2(x)}} \quad (1-4)$$

dont on déduit :

$$S(x) = \frac{U(x) u_1(x)}{u_2(x)(1-U(x))}$$

Décrivons cette dernière expression et effectuons le remplacement dans l'équation(1-3). Nous obtenons :

$$U' = \frac{V}{pW} u_1 u_2 - W \frac{U^2 - U}{u_1 u_2} \quad (1-5)$$

(équation de phase transformée)

Afin d'utiliser des majorations assez évidentes, nous faisons les hypothèses suivantes :

$$1^\circ) V(x) \leq 0$$

2°) u_1 et u_2 sont choisis de telle sorte que

$$W(x) = u_1(x)u_2'(x) - u_2(x)u_1'(x) > 0$$

$$\text{et } u_1(x)u_2(x) < 0$$

(pour la majoration $U < 1$)

On tire de (1-4) les conditions sur U , en remplaçant S successivement par ses valeurs en a et R :

$$S(a) = 0 \quad \Rightarrow \quad U(a) = 0$$

$$S(R) = \infty \quad \Rightarrow \quad U(R) = 1$$

Nous aurons donc

$$0 \leq S \leq \infty \quad \stackrel{\text{T.H.}}{\Leftrightarrow} \quad 0 \leq U \leq 1 \quad (1-6)$$

On en déduit qu'un état lié correspondra à un passage de U par la valeur 1.

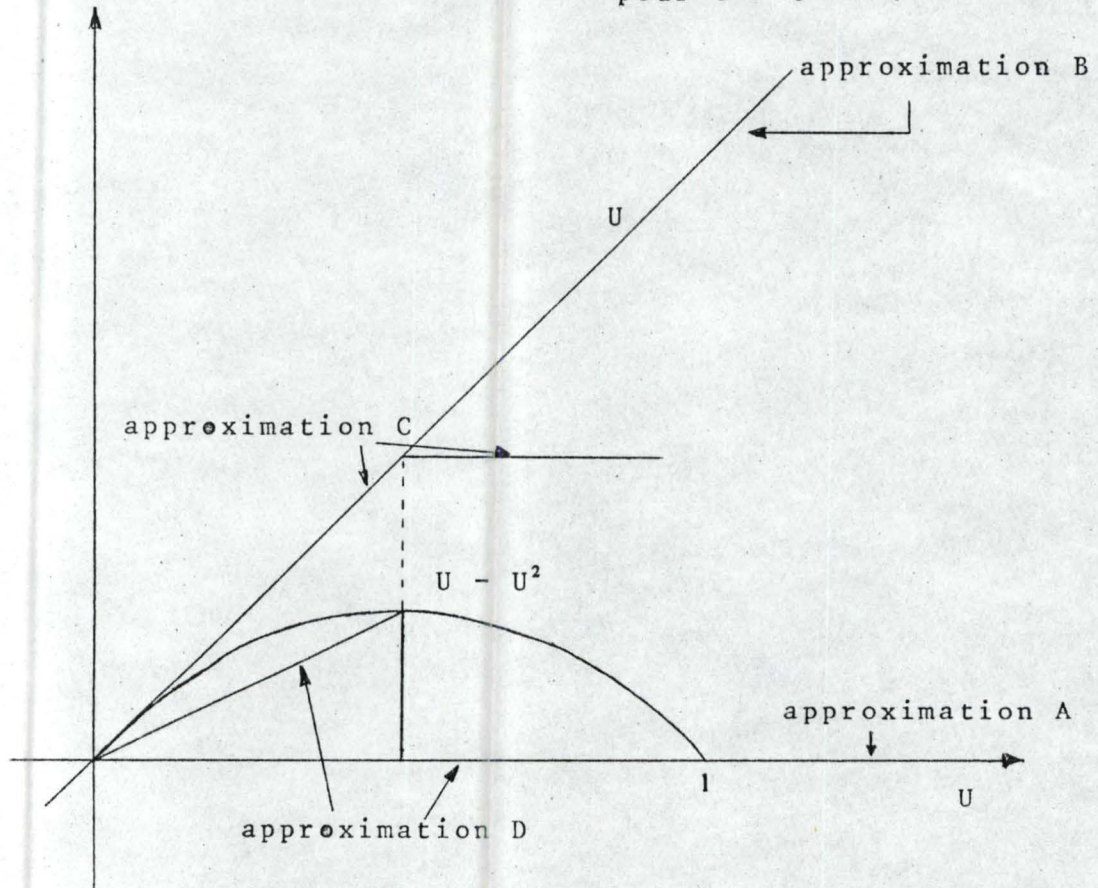
On considère les approximations usuelles [1] [2]

$$A) \quad U^2 - U < 0 \quad \text{si } 0 < U < 1 \quad (1-7)$$

$$B) \quad \text{et } 0 < U^2 \quad (1-8)$$

$$0 \leq U - U^2 \leq U$$

pour $0 < U < 1$



Les approximations A et B sont du 1^{er} ordre. Les approximations du 2^{ème} ordre (C, D, ...) peuvent également être utilisées [2]

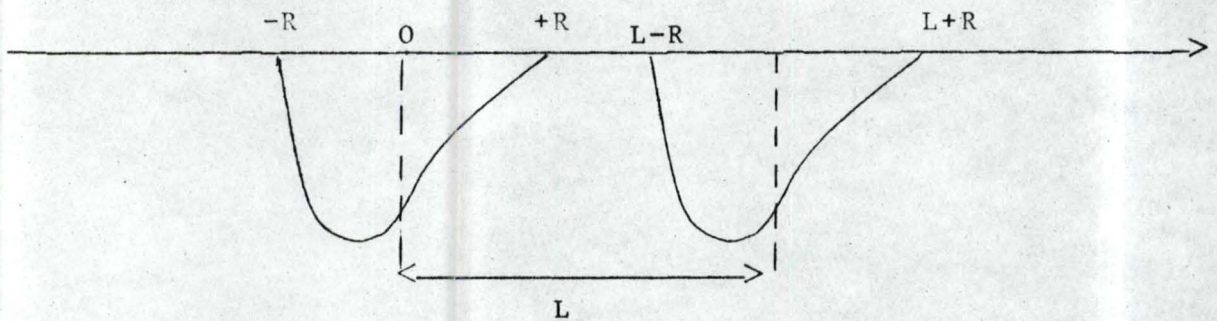
Ces approximations donnent les conditions nécessaires et suffisantes suivantes d'obtention d'un pôle :

$$\text{pôle de } S \Rightarrow \int_a^R \frac{|V(x)|}{p(x)W(x)} |u_1(x)u_2(x)| dx > 1$$

$$\left| \frac{u_2(R)}{u_1(R)} \right| \int_a^R |V(x)| u_1^2(x) dx > 1 \Rightarrow \text{pôle de } S$$

2. CONDITIONS AUX LIMITES PERIODIQUES

On considère le potentiel périodique suivant :



$$V(x + L) = V(x)$$

$$L \geq 2R$$

$$V(x) \leq 0$$

Considérons l'équation de la forme :

$$u''(x) - q^2 u(x) = V(x)u(x)$$

On choisit : $u_1(x) = e^{-qx}$

$$u_2(x) = e^{qx} \quad (W > 0)$$

L'équation de phase associée

$$S'(x) = \frac{V(x)}{2q} (e^{-qx} + S(x)e^{qx})^2 \quad (1-9)$$

$$\text{avec } S(x) = \frac{C_2(x)}{C_1(x)}$$

$$u(x) = C_1(x)e^{-qx} + C_2(x)e^{qx}$$

L'inverse de la dérivée logarithmique vérifie l'équation

$$\boxed{\Gamma(x) = \Gamma(x + L)} \quad (1-10)$$

$$\text{avec } \Gamma(x) = \frac{u(x)}{u'(x)}$$

et la relation suivante exprime $\Gamma(x)$ en fonction de $S(x)$

$$\begin{aligned} \Gamma(x) &= \frac{e^{-qx} + S(x)e^{qx}}{-qe^{-qx} + qS(x)e^{qx}} \\ &= \frac{e^{-q(x+L)} + S(x+L)e^{q(x+L)}}{-qe^{-q(x+L)} + qS(x+L)e^{q(x+L)}} = \Gamma(x+L) \end{aligned}$$

dont on déduit :

$$\boxed{S(x) = e^{2qL} S(x+L)} \quad (1-11)$$

Si le potentiel est symétrique, on peut déterminer séparément le spectre pair et impair en fonction de la condition initiale : [7]

$$u(0) = 0 \text{ (cas } \underline{\text{impair}})$$

$$\Rightarrow S(0) = -1$$

$$S(R) = 0$$

(1-12)

$$u'(0) = 0 \text{ (cas } \underline{\text{pair}})$$

$$\Rightarrow S(0) = +1$$

$$S(R) = 0$$

(1-13)

Dans le cas contraire, (potentiel asymétrique), le caractère intégrable de la solution implique :

$$S(-R) = \infty$$

$$S(R) = 0$$

(1-14)

Les limites des bandes de solutions permises sont dès lors déterminées par les valeurs de q satisfaisant l'équation de phase (1-9) et les conditions :

$$S(0) = -1 \quad S(L) = -e^{-2qL} \quad \text{si le potentiel est symétrique et cas impair} \quad (1-15)$$

$$S(0) = +1 \quad S(L) = +e^{-2qL} \quad \text{si le potentiel est symétrique et cas pair} \quad (1-16)$$

$$S(-R) = \infty \quad \frac{S(L+R)}{S(R)} = +e^{-2qL} \quad \text{cas asymétrique} \quad (1-17)$$

Si on définit :

$$A(x) = \frac{1}{2q} \left(\frac{S(x) - S(0)}{S(x) - S(L)} \right), \quad (1-18)$$

l'équation de phase (1-9) devient :

$$A'(x) = \frac{V(x)e^{-2qx}}{S(0)[1 - e^{-2qL}]} \left[A(1 + S(0)e^{2q(x-L)}) - \frac{1}{2q}(e^{2qx}S(0) + 1) \right]^2 \quad (1-19)$$

avec les conditions :

$$\begin{cases} A(0) = 0 \\ A(L) = \infty \end{cases} \quad (1-20)$$

En posant : $X = 1 + S(0)e^{2q(x-L)}$

$$Y = -\frac{1}{2q} [e^{2qx}S(0) + 1] \quad (1-21)$$

$$W = \frac{V(x)e^{-2qx}}{S(0)[1 - e^{-2qL}]}$$

l'équation (1-19) apparaît sous une forme plus concise :

$$A'(x) = W [AX + Y]^2$$

Afin de se ramener aux majorations usuelles, on effectue la T.H.

$$U(x) = \frac{AX}{AX + Y}$$

qui transforme (1-19) sous la même forme que (1-5). En effet on obtient :

$$\left(\frac{Y}{X}\right)'(U - U^2) + \frac{Y}{X} U' = WY^2 \quad (1-22)$$

avec les conditions aux limites valables dans tous les cas.

$$U(0) = 0$$

$$U(L) = 1$$

Les majorations usuelles

$$U^2 - U < 0 \quad \text{si } 0 < U < 1 \text{ et } 0 < U^2$$

donneront les conditions nécessaires et suffisantes à l'obtention de la première bande.

3. Remarques : Pour l'équation de Schroedinger,

$$u''(x) + Eu(x) = V(x)u(x)$$

les conditions suivantes doivent être satisfaites à l'extérieur de $-R < x < +R$ afin d'assurer l'intégrabilité de $u(x)$ sur $(-\infty, +\infty)$.

$$x \geq R \quad \text{élimination de la solution } u_1 = e^{+\sqrt{|E|}x}$$

$$x \leq -R \quad \text{élimination de la solution } u_2 = e^{-\sqrt{|E|}x}$$

La solution étant écrite sous la forme

$$u = C_1 u_1 + C_2 u_2$$

ces conditions entraînent $C_2(R) = 0$

et $C_1(-R) = 0$ (voir pp.: 8)

4. Tableaux :

Les tableaux permettent de résumer les résultats et les méthodes de résolution que l'on vient d'expliciter.

TABLEAU I.1. : MAJORATION (POTENTIEL NON PERIODIQUE)

$$[p(x)u'(x)]' + q(x)u(x) = V(x)u(x)$$

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \\ V(x) &\neq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u(x) &= C_1 u_1(x) + C_2 u_2(x) \\ \begin{bmatrix} u \\ u' \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} u_1 & u_2 \\ u'_1 & u'_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1(x) \\ C_2(x) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$W = u_1 u'_2 - u'_1 u_2$$

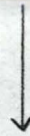
$$S(x) = \frac{C_2(x)}{C_1(x)} = \text{phase}$$

$$S'(x) = \frac{V(x)}{p(x)W(x)} [u_1(x) + S(x)u_2(x)]^2$$

equation de phase de Riccati

$$S(0) = 0$$

$$S(R) = \infty$$



$$U = \frac{Su_2}{u_1 + Su_2}$$

$$U' = \frac{V}{pW} - W \frac{U^2 - U}{u_1 u_2}$$

Approximation A $U^2 - U \ll 0$

$$0 \ll U \ll 1 \quad \text{pôle de } S \Rightarrow \int_0^R \left| \frac{V}{pW} u_1 u_2 \right| dx > 1$$

B $U^2 \geq 0$

$$\left| \frac{u_2(R)}{u_1(R)} \right| \left| \int_0^R |V| u_1^2 dx \right| > 1 \Rightarrow \text{pôle de } S$$

avec choix adéquat des u_i et propriété de V, p, \dots

TABLEAU I.2. : MAJORATION (POTENTIEL PERIODIQUE)

$$\begin{aligned} u'' + \lambda u &= Vu \\ V(x+L) &= V(x) \end{aligned}$$

$$\lambda = -q^2 \quad q \geq 0$$

V(x) périodique

symétrique

asymétrique

pair

impair

$$u'(0) = 0$$

$$u(0) = 0$$

$$S(-R) = \infty$$

$$S(R) = 0$$

$$S(0) = +1$$

$$S(0) = -1$$

$$S'(x) = \frac{V(x)}{2q} (e^{-qx} + S(x)e^{qx})^2$$

$$S(x) = e^{2qL} S(x+L)$$

$$S(L) = e^{-2qL}$$

$$S(L) = -e^{-2qL}$$

$$\text{T.H. } A(x) = \frac{1}{2q} \left(\frac{S(x) - S(0)}{S(x) - S(L)} \right)$$

$$A'(x) = \frac{V(x)e^{-qx}}{S(0)[1-e^{-2qL}]} \left[A(1+S(0)e^{2q(x-L)}) - \frac{1}{2q}(e^{2qx}S(0)+1) \right]^2$$

$$A(0) = 0$$

$$A(L) = \infty$$

$$\text{T.H. } U(x) = \frac{AX}{AX + Y}$$

$$\left(\frac{Y}{X}\right)' (U - U^2) + \frac{Y}{X} U' = WY^2$$

Approximation A

$$U^2 - U \leq 0 \quad 0 \leq U \leq 1 \quad \Rightarrow$$

B

$$U^2 \geq 0 \quad \Rightarrow$$

} voir ch. IV (suivant cas pair, impair ou asymétrique)

CHAPITRE II : POTENTIEL DE DIRAC

1. CALCUL DE LA PHASE DANS LE CAS D'UN POTENTIEL DE DIRAC

a) Considérons l'équation de phase :

$$S' = \frac{V}{W} (u_1 + Su_2)^2$$

associée à l'équation différentielle :

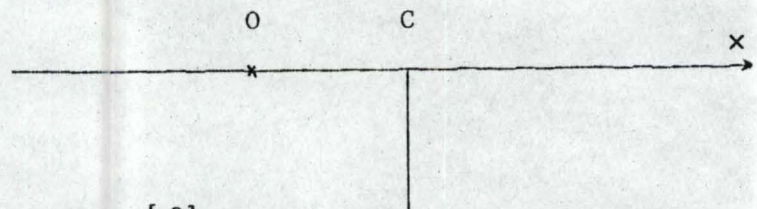
$$u''(x) + pu'(x) + qu(x) = V(x)u(x)$$

$$C \begin{cases} u(0) = \mu, & \mu'(0) = \gamma \\ u \text{ continue} \end{cases}$$

Si $V = 0$, la solution s'écrit : $u = C_1 u_1 + C_2 u_2$

Considérons à présent un potentiel de Dirac :

$$V(x) = -A\delta(x-C) \text{ où } \delta(x) \text{ est la distribution de Dirac}$$



[8]

La phase $S(x)$ possède une discontinuité en C . En effet, $\forall x \neq C$, l'équation de phase se réduit à

$$S'(x) = 0$$

$S(x)$ est donc une constante qui, à gauche de C vaut $S(C^-)$ et qui vaut $S(C^+)$ à droite de C . Et donc :

$$\lim_{\substack{x \rightarrow C \\ >}} S(x) = S(C^+) = S_+$$

et

$$\lim_{\substack{x \rightarrow C \\ <}} S(x) = S(C^-) = S_-$$

Calculons $\Delta S = S_+ - S_- = \text{saut de discontinuité.}$
(2-1)

Intégrons, sur un intervalle entourant C, l'équation :

$$\underline{u''(x) + pu'(x) + qu(x) = -A\delta(x - C)u(x)}$$

A cet effet, nous allons diviser les 2 membres de l'équation par $-Au(C)$, [9]

$$\Rightarrow -\frac{1}{Au(C)}u''(x) + \frac{p}{-Au(C)}u'(x) - \frac{q}{Au(C)}u(x) = \delta(x - C)$$

(2-2)

Par intégration :

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=C^+} - \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=C^-} = \frac{1}{a_0(x)} = -Au(C)$$

$$\Rightarrow \Delta u'(C) = \frac{u'(C^+) - u'(C^-)}{1} = -Au(C)$$

$$\text{ou } \underline{\Delta U' = U'_+ - U' = -AU} \quad (2-3)$$

Posons :

$$\Gamma(x) = \frac{u(x)}{u'(x)} = \frac{u_1 + Su_2}{u'_1 + Su'_2} \quad (2-4)$$

$$(8) \Rightarrow \Gamma_+^{-1} = \frac{U'_+}{U_+} = -A + \Gamma_-^{-1}$$

Si on introduit (2-4) dans cette relation, nous obtenons finalement, après développement :

$$\Delta S = S_+ - S_- = (I + W^{-1}AU_2(U_1 + S_-U_2))^{-1} \cdot (-AW^{-1}(U_1 + S_-U_2)^2)$$

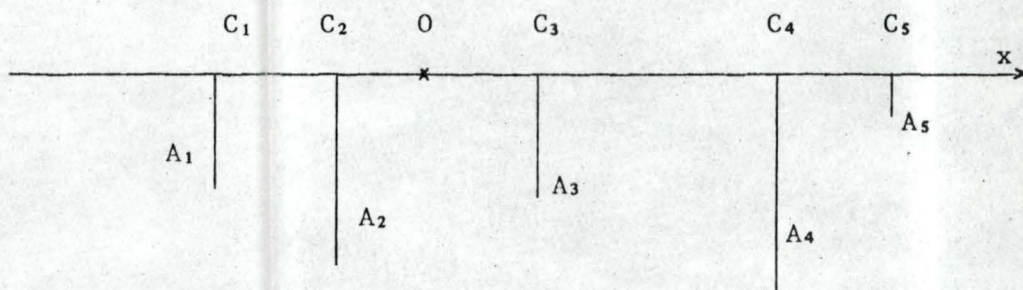
c'est-à-dire :

$$S_+ = \frac{AU_1^2 + S_-(W + AU_1U_2)}{W - AU_2(U_1 + S_-U_2)} \quad (2-5)$$

b) Dans le cas général où l'on a contribution de plusieurs distributions deltas, c'est-à-dire lorsque

$$p(x) = \sum_{i=1}^N A_i \delta(x - C_i),$$

$S(x)$ est une constante entre C_i et C_{i+1}



Supposons que l'on ait $N-1$ distribution delta.

On notera $S_+(C_{N-1}) \equiv S^{N-1} = 0$

Ajoutons maintenant un n^{e} point en $x=C_N$ ($C_N > C_{N-1}$);

la valeur de la phase sera nulle en $S_+(C_N) \equiv S_N = 0$.

De plus, S_N et S_{N-1} seront liés par la même relation que précédemment (due à la discontinuité de la phase)

$$S_N = \frac{-A_N \cdot U_1^2 + S^{N-1}(W + A_N U_1 U_2)}{W - A_N U_2 (U_1 + S^{N-1} U_2)} \quad (2-6)$$

2. APPLICATION A SCHROEDINGER (POTENTIEL δ NON PERIODIQUE)

a) soit L l'opérateur suivant :

$$\boxed{L = -\frac{d^2}{dx^2} + 2V} \quad (2-7)$$

$$(\hbar = 1)$$

$$(m = 1)$$

Pour un potentiel symétrique ($V(x)=V(-x)$), le spectre pair et impair peut être calculé séparément en fonction des conditions à l'origine :

$$\begin{cases} u(0) = 0 & \text{cas impair} \\ u'(0) = 0 & \text{cas pair} \end{cases}$$

ce qui nous amène à :

$$\begin{cases} S(0) = -1 & S(R) = 0 & \text{cas impair} \\ S(0) = +1 & S(R) = 0 & \text{cas pair} \\ S(-R) = \infty & S(R) = 0 & \text{cas asymétrique} \end{cases}$$

Soit V potentiel de Dirac de la forme

$$V(x) = -Z\delta(x - C)$$

Soit $2E = -q^2$, alors $W = 2q$

$$u_1 = e^{-qx}$$

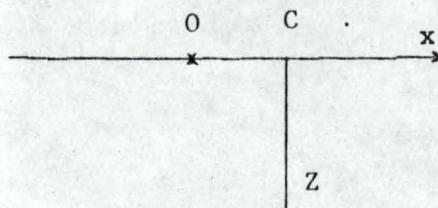
$$u_2 = e^{qx}$$

La relation (2-5) devient :

$$\boxed{S_+ = \frac{-Z \exp(-2qC) + S_-(q - Z)}{q + Z + S_- Z \exp(2qC)}} \quad (2-8)$$

b) V une seule fonction delta = $-2Z\delta(x-C)$

On se place donc dans le cas asymétrique.



Dans ce cas, (2-8) donne :

$$S_+ = \frac{q - Z}{Z \exp(2qC)} = 0$$

C'est-à-dire : $q = Z$ (2-9)

c) V : un nombre fini N de fonctions deltas

La relation (2-6) est en fait une relation de récurrence qui nous permet de déterminer une équation donnant la valeur de q en fonction de Z .

L'équation transcendante ainsi obtenue est explicite en q et Z et permet de déterminer aisément la valeur d'une variable en fonction de l'autre.

Dans le cas asymétrique, la récurrence débute par :

$$S^1 = \frac{q - Z_1}{Z_1 \exp(2qC_1)}$$

Dans le cas symétrique, la récurrence débute par :

$$S^1 = \frac{-Z_1 \exp(-2qC_1) + q - Z_1}{q + Z_1 + Z_1 \exp(2qC_1)} \quad (2-10)$$

dans le cas pair

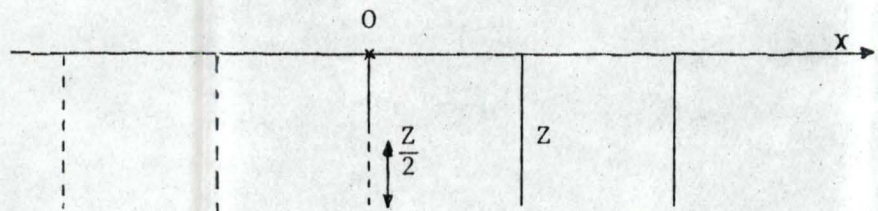
et par :

$$S^1 = \frac{-Z_1 \exp(+2qC_1) - q + Z_1}{q + Z_1 - Z_1 \exp(2qC_1)} \quad (2-11)$$

dans le cas impair

Remarques :

- 1) Dans le cas symétrique, il faut remarquer que $N = 2j$ où j est le nombre de C_j positif.
- 2) Toujours dans le cas symétrique comportant un nombre impair de fonction delta, il suffit de diviser par 2 la "valeur" de la fonction delta située à l'origine dans le but de générer le potentiel initial après réflexion.



d) Application

Appliquons nous maintenant à rechercher la forme des E.T. dans le cas d'une répétition de N fonctions delta ($N = 2, 3, 4, 5$). Nous supposons les N delta équidistants et de même "puissance".

On notera :

$$\begin{cases} R = C_{i+1} - C_i \\ Z = Z_i \\ E = \frac{-q^2}{2} \end{cases}$$

$N=2$

$$\frac{Z \exp(-qR)}{q - Z} = \begin{array}{l} +1 \quad (\text{spectre pair}) \\ -1 \quad (\text{spectre impair}) \end{array} \quad (2-12)$$

 $N=3$

$$\frac{Z \exp(-2qR)}{q - Z} = \begin{array}{l} \frac{q - Z}{q + Z} \quad (\text{spectre pair}) \quad (2 \text{ racines}) \\ -1 \quad (\text{spectre impair}) \quad (1 \text{ racine}) \end{array}$$

 $N=4$

$$\frac{Z \exp(-3qR)}{q - Z} = \begin{array}{l} \frac{-Z \exp(-qR) + q - Z}{q + Z + Z \exp(qR)} \quad (\text{spectre pair}) \\ \frac{-Z \exp(-qR) - q + Z}{q + Z - Z \exp(qR)} \quad (\text{spectre impair}) \end{array} \quad \begin{array}{l} (2 \text{ racines}) \\ (2 \text{ racines}) \end{array}$$

 $N=5$

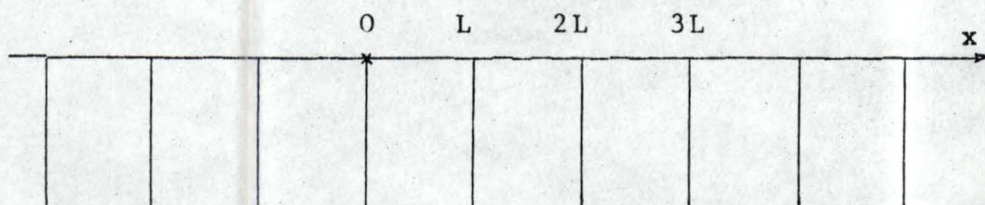
$$\frac{Z \exp(-4qR)}{q - Z} = \begin{array}{l} \frac{-Z(q+Z) \exp(-2qR) + (q-Z)^2}{(q+Z)^2 + Z(q-Z) \exp(2qR)} \quad (\text{pair}) \quad (3 \text{ racines}) \\ \frac{-Z \exp(-2qR) - q + Z}{q + Z - Z \exp(2qR)} \quad (\text{impair}) \quad (2 \text{ racines}) \end{array}$$

3. DETERMINATION DU SPECTRE DANS LE CAS DE POTENTIEL PERIODIQUE

A) 1 seule distribution [9]

Dans le paragraphe précédent, nous avons déterminé des E.T. dans le cas où le potentiel distribution de Dirac était représenté 1 fois, 2 fois, ... 5 fois

Nous allons maintenant généraliser ces résultats au cas où le potentiel est répété de façon infinie, et ce à intervalles réguliers, c'est-à-dire au cas où le potentiel est périodique.



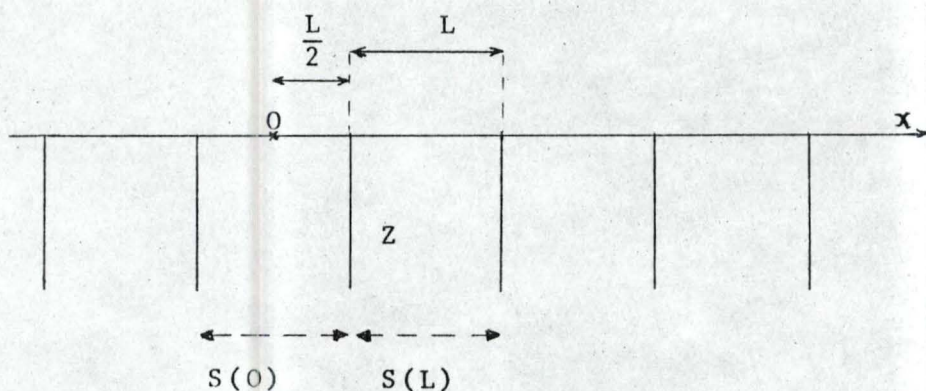
(*)

Appelons L la période du potentiel. Ici aussi, $Z_i = Z \forall i$ (le potentiel étant périodique)

La relation (2-6)

$$S^N = \frac{-Ze^{-2qC} + S^{N-1}(q - Z)}{q + Z + S^{N-1}Z \exp(2qC)} \text{ reste vérifiée.}$$

Choisissons la représentation suivante :



On aurait pu tout aussi bien choisir la représentation (*). Il aurait alors suffi de placer une distribution delta de puissance $\frac{Z}{2}$ en 0.

a° spectre pair :

$$S(0) = 1 \quad \text{et} \quad S(L) = +e^{-2qL}$$

(2-6) devient dans ce cas :

$$\frac{-Ze^{-qL} + q - Z}{q + Z + Ze^{qL}} = e^{-qL}$$

En tenant compte du fait que $\sinh(qL) = \frac{e^{qL} - e^{-qL}}{2}$
 et $\cosh(qL) = \frac{e^{qL} + e^{-qL}}{2}$

on obtient l'E.T. suivante :

$$\cosh(qL) - \frac{q}{Z} \sinh(qL) = -1$$

c'est-à-dire :

$$\cosh(\sqrt{-2E} L) - \frac{q}{Z} \sinh(\sqrt{-2E} L) = -1 \quad (2-13)$$

b° spectre impair :

$$S(0) = -1 \text{ et } S(L) = -e^{-2qL}$$

(2-6) devient dans ce cas :

$$\frac{-Ze^{-qL} - q + Z}{q + Z - Ze^{qL}} = -e^{-2qL}$$

On obtient l'E.T. suivante :

$$\cosh(\sqrt{-2EL}) - \frac{q}{Z} \sinh(\sqrt{-2EL}) = +1 \quad (2-14)$$

Les équations (2-12) et (2-13) particularisent des résultats de Hund, qui lui donne des équations, non seulement pour les extrémités des bandes du spectre mais aussi pour les énergies comprises à l'intérieur de la bande.

Pour arriver à ce résultat, Hund élabore une théorie très différente de la nôtre; elle a pour base la résolution d'un système d'équations linéaires. Dans ce cas, les E.T. sont déterminées par les valeurs qui annulent le déterminant du système.

Remarques :
.....

- 1) $q > 0$ donne naissance à une bande unique de solutions permises. Les extrémités de cette bande sont données par les équations (2-13) et (2-14). L'extrémité inférieure de la bande correspond à la solution périodique paire (2-13) et l'extrémité supérieure correspond à la solution périodique impaire (2-14).
- 2) La théorie développée par Hund^[10] aboutit aux résultats suivants :

$$\text{Si l'on note } E = \frac{-q^2}{2} \text{ (énergie)}$$

W_n = la puissance de la n^{e} distribution delta
située au point a_n (c'est-à-dire en ce
point $V = -W_n \delta(x-a_n)$)

avec $W_n > 0$ et $n \in \mathbb{Z}$

$$a_{ij} = |a_j - a_i|$$

L'équation transcendante donnant les énergies per-
mises est donnée par :

$$\begin{vmatrix} W_1 - \ell & W_2 e^{-\ell a_{12}} & W_3 e^{-\ell a_{13}} & \dots \\ W_2 e^{-\ell a_{12}} & W_2 - \ell & W_3 e^{-\ell a_{23}} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0$$

Par exemple : si l'on examine le cas de 2 distri-
butions deltas de même puissance Z
placées respectivement en $-\frac{R}{2}$ et $\frac{R}{2}$,
on obtient :

$$\begin{vmatrix} Z - \ell & Z e^{-\ell R} \\ Z e^{-\ell R} & Z - \ell \end{vmatrix} = 0$$

$$\text{d'où } (Z-\ell)^2 = Z^2 e^{-2\ell R} \iff \frac{Z e^{-\ell R}}{Z-\ell} = \pm 1$$

et on retrouve nos résultats (2-12)

Dans le cas périodique ($V = -W \sum_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a_n)$), un autre
développement de sa théorie lui permet de dire que la
seule bande d'énergies négatives permises est décrite
par :

$$\cosh \ell a - \frac{W}{\ell} \sinh \ell a = \cos ka \quad (a \text{ étant la période})$$

3) Les équations (2-13) et (2-14) se réduisent
respectivement à :

$$\text{th } \frac{qL}{2} = \begin{cases} \frac{Z}{q} \\ \frac{q}{Z} \end{cases}$$

Le premier de ces résultats est celui de Hund pour $k = 0$ tandis que le second correspond à

$$k = \frac{\pi}{L}.$$

En effet, Hund démontre que toute solution appartenant à la seule bande permise est telle que :

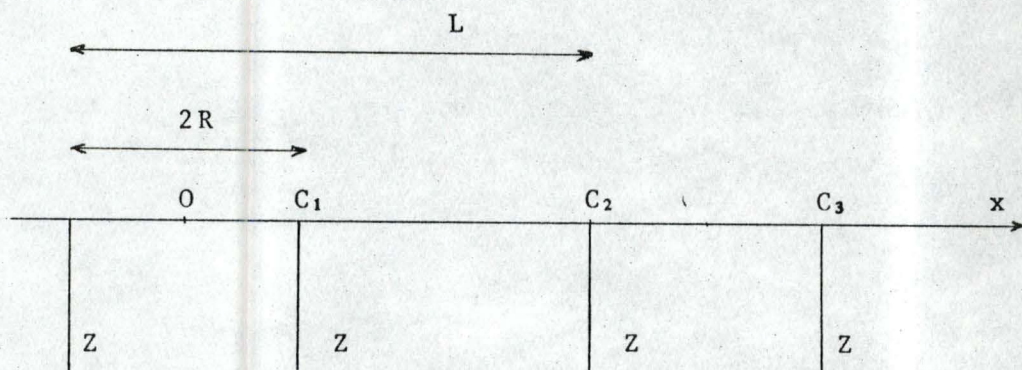
$$\cosh qL - \frac{Z}{q} \sinh qL = \cos kL.$$

4) L'équation de Hund bien que différente de (2-13) et (2-14), donne les mêmes résultats pour

$$k = 0 \text{ et } \frac{\pi}{L}.$$

B) 2 distributions de même valeur

Analysons maintenant le cas où un motif de 2 deltas de même puissance est répété infiniment avec une période L . On note $2R$ distance qui les sépare.



Comme le potentiel est symétrique, on peut caractériser séparément le spectre pair et le spectre impair.

Les relations suivantes nous permettent de déterminer les équations transcendantes voulues :

$$S(0) = S_-(C_1)$$

$$S_+(C_1) = \frac{-Ze^{-2qR} + S_-(C_1)(q-Z)}{q+Z + S_-(C_1)e^{2qR}}$$

$$S_-(C_2) = S_+(C_1) \quad (2-15)$$

$$S_+(C_2) = \frac{-Ze^{-2q(L-R)} + S_-(C_2)(q-Z)}{q+Z + S_-(C_2)e^{2q(L-R)}}$$

$$S_+(C_2) = S(C_3) = S(0)e^{-2qL}$$

a) spectre pair $S(0) = +1$

On obtient par les relations (2-15)

$$\begin{aligned} & -Z(q+Z)e^{-2q(L-R)} - Z^2 e^{2q(2R-L)} - (q-Z)Ze^{-2qR} + (q-Z)^2 \\ & = e^{-2qL} [(q+Z)^2 + (q+Z)Ze^{2qR} - Z^2 e^{-2q(2R-L)} + Z(q-Z)e^{2q(L-R)}] \end{aligned}$$

(2-16)

b) spectre impair $S(0) = -1$

On obtient par les relations (2-15)

$$\begin{aligned} & -(q+Z)Ze^{-2q(L-R)} + Z^2 e^{-2q(L-2R)} - (q-Z)Ze^{-2qR} - (q-Z)^2 \\ & = -e^{-2qL} [(q+Z)^2 - Z(q+Z)e^{2qR} - Z^2 e^{2q(L-2R)} + Z(Z-q)e^{2q(L-R)}] \end{aligned}$$

(2-17)

Remarque :

Le cas particulier $L=2R$ correspond à un potentiel périodique L , formé de distributions delta de puissance $Z_* = 2Z$. Or dans ce cas, les deux résultats précédents (2-16) et (2-17) deviennent respectivement :

$$Z_* \cosh qL - q \sinh qL = -Z_*$$

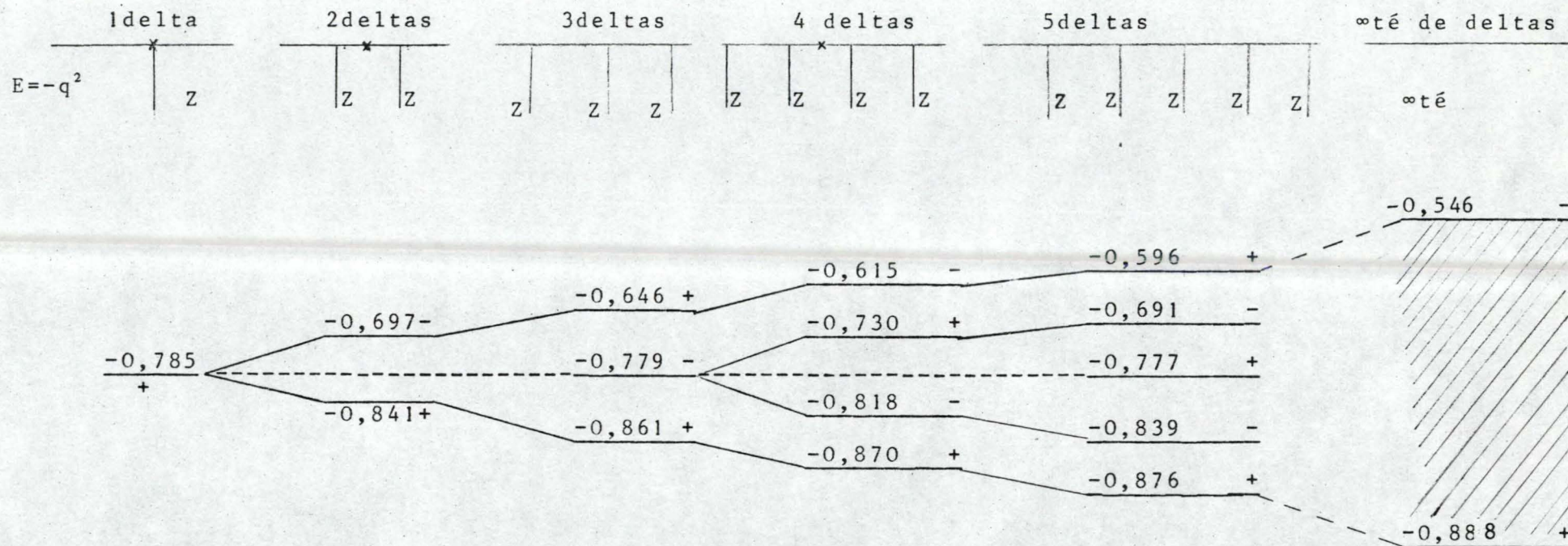
$$\text{et } Z_* \cosh qL - q \sinh qL = +Z_*$$

et l'on retrouve les résultats (2-13) et (2-14) établis précédemment.

TABLEAU II-1 : APPLICATION NUMERIQUE

période $R = \pi$

puissance de la distribution delta $\equiv Z = \frac{\pi}{4}$.



Ce tableau indique la(les) valeur(s) de q ($E = -q^2$) donnant respectivement 1, 2, 3, 4, 5 états liés ou la bande de solutions permises (cas périodique). Le signe + signifie solution paire et le signe - signifie solution impaire.

Remarque 1. Ces résultats sont consistants avec ceux de Chris Rorres [11] et Hund [10]

2. Les E.T. ont été résolues numériquement sur ordinateur Siemens (double précision)

CHAPITRE III. - CARACTERISATION DU 1^{er} ET DU N^e ETAT LIE
DANS LE CAS D'UN POTENTIEL QUELCONQUE NON PERIODIQUE

1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous étudierons le spectre de l'opérateur (ii)

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

dans lequel $V(x)$ est un potentiel négatif quelconque, éventuellement répété (mais de façon finie !)

Par souci de concision, la méthode employée étant la même dans chaque cas, les résultats essentiels seront seuls repris et notés dans des tableaux.

Nous nous attacherons à déterminer une CN et une CS à l'obtention du premier état lié dans divers cas dans les tableaux I à IV. Les tableaux suivants donneront les CN et CS à l'obtention du n^e état lié.

On trouvera :

	CN et CS 1 ^{er} état lié	CN et CS n ^e état lié
$E \neq 0$	<p>potentiel asymétrique (tableau III-1)</p> <p>potentiel symétrique (tableau III-2)</p>	<p>potentiel asymétrique (tableau III-5)</p> <p>potentiel symétrique (tableau III-6)</p>
$E = 0$	<p>potentiel symétrique (tableau III-3)</p> <p>potentiel symétrique doublé (tableau III-4)</p>	<p>potentiel asymétrique (tableau III-7)</p> <p>potentiel symétrique (tableau III-8)</p>

- a) La méthode employée pour déterminer les résultats de la première colonne (tableaux 1 à 4) est celle développée au chapitre I et résumée dans le tableau I-2. [4] [12]

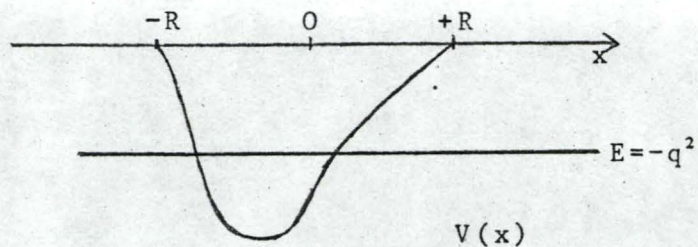
Il nous faudra choisir les u_i de façon à ce que le Wronskien soit positif. Ensuite, après avoir déterminé les valeurs aux limites de S et vérifié les hypothèses sur V , p , ..., il suffira d'appliquer les résultats des approximations A et B.

Deux remarques importantes s'avèrent nécessaires :

- 1° si le potentiel est symétrique, on peut caractériser séparément les états liés pairs et les états liés impairs (en fonction des conditions initiales).
 - 2° lorsque $V(+\infty) = V(-\infty) = A$, il existe toujours au moins un état lié. Si de plus V est symétrique, l'état fondamental (le plus bas) est un état pair (+).
- b) Les résultats de la 2^e colonne (tableaux 5 à 8) sont les applications de la théorie résumée dans l'annexe III et développée longuement dans [3]

TABLEAU III-1: PREMIER ETAT LIE

$E \neq 0$
potentiel asymétrique



$$\begin{cases} V(x) \neq V(-x) \\ V(x) \leq 0 & |x| < R \\ V(x) = 0 & |x| \geq R \end{cases}$$

$$u'' + Eu = Vu$$

$$u_1 = e^{-qx} \qquad u_2 = e^{qx}$$

$$S' = \frac{V}{2q} (e^{-qx} + Se^{qx})^2$$

$$E = -q^2 \quad (q > 0)$$

$$W = 2q$$

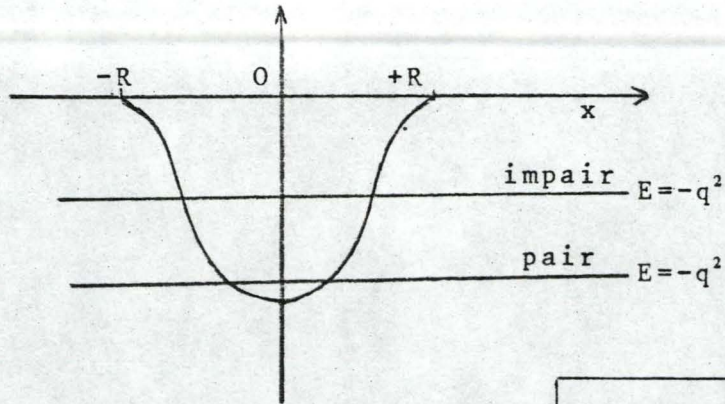
$$S(-R) = \infty \qquad S(R) = 0$$

$$\exists \text{ état lié d'énergie } E \Rightarrow \int_{-R}^{+R} \frac{|V(x)|}{2q} dx > 1$$

$$\frac{e^{-2qR}}{2q} \int_{-R}^{+R} V(x) e^{2qx} dx > 1 \Rightarrow \exists \text{ état lié d'énergie } E$$

TABLEAU III-2 : PREMIER ETAT LIE

$E \neq 0$
potentiel symétrique



$$\begin{cases} V(x) = V(-x) \\ V(x) = 0 & |x| \geq R \\ V(x) \leq 0 & |x| < R \end{cases}$$

$$u'' + Eu = Vu$$

$$u_1 = e^{-qx} \qquad u_2 = e^{+qx}$$

$$S' = \frac{V}{2q} (e^{-qx} + S(x)e^{qx})^2$$

$$E = -q^2 \qquad q > 0$$

$$W = 2q$$

Cas pair : $u(x) = u(-x)$
 $(u'(0) = 0)$
 $(u(0) \neq 0)$

cas impair : $u(x) = -u(-x)$
 $(u(0) = 0)$
 $(u'(0) \neq 0)$

$$S(0) = +1 \qquad S(R) = 0$$

$$A = \frac{S - 1}{2qS}$$

$$S(0) = -1 \qquad S(R) = 0$$

$$A = \frac{S + 1}{2qS}$$

$$\exists \text{ état lié pair à énergie } E \Rightarrow \int_0^R |V| e^{-qx} \frac{\cosh qx}{q} dx > 1$$

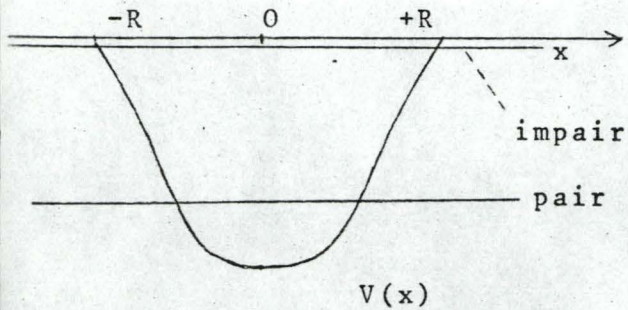
$$\exists \text{ état lié impair à énergie } E \Rightarrow \int_0^R |V(x)| e^{-qx} \frac{\sinh qx}{q} dx > 1$$

$$\int_0^R |V(x)| \frac{\cosh^2 qx}{q} dx > e^{qR} \cosh qR \Rightarrow \exists \text{ état lié pair à énergie } E$$

$$\int_0^R |V| \frac{\sinh^2 qx}{q} dx > e^{qR} \sinh qR \Rightarrow \exists \text{ état lié impair à énergie } E$$

TABLEAU III-3 : PREMIER ETAT LIE

$E = 0$
potentiel symétrique



$$\begin{cases} V(x) = V(-x) \\ V(x) = 0 \\ V(x) \leq 0 \end{cases} \quad \begin{matrix} |x| \geq R \\ |x| < R \end{matrix}$$

$$\begin{aligned} & \underline{u'' = Vu} \\ & u_1 = x \qquad u_2 = -1 \\ & S'(x) = V(x) (x - S(x))^2 \end{aligned}$$

$$W = 1$$

cas pair : $u(x) = u(-x)$

$$S(0) = \infty \qquad S(R) = \infty$$

×

1er état lié pair existe toujours

cas impair : $u(x) = -u(-x)$

$$S(0) = 0 \qquad S(R) = \infty$$

$$u = \frac{S}{S - x}$$

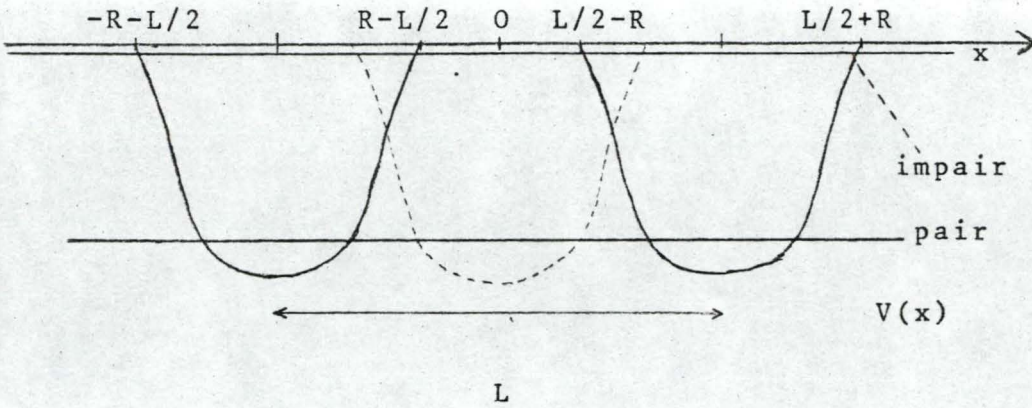
$$\begin{aligned} \exists \text{ état lié impair} & \Rightarrow \int_0^R |V(x)| x \, dx > 1 \\ \int_0^R |V(x)| x^2 \, dx > R & \Rightarrow \exists \text{ état lié impair.} \end{aligned}$$

Remarque : Les résultats du tableau 3.II. se réduisent à ceux-ci lorsque E devient nulle.

TABLEAU III-4 : PREMIER ETAT LIE

[13]

$E = 0$
potentiel symétrique doublé



$$\left\{ \begin{array}{l} V(x) = V(-x) \\ V(x) = 0 \quad |x| > R + \frac{L}{2} \\ V(x) < 0 \quad |x| < \frac{L}{2} - R \end{array} \right\} \text{ sur } [0, L]$$

$$V(x) = V_{\text{init}}(|x| - \frac{L}{2})$$

(V_{init} en trait pointillé)

$$\underline{u'' = Vu}$$

$$u_1 = x \quad u_2 = -1 \quad W = +1$$

$$S'(x) = V(x)(x - S(x))^2$$

cas pair : $u(x) = u(-x)$
 $S(0) = \infty \quad S(R) = \infty$

cas impair : $u(x) = -u(-x)$
 $S(0) = 0 \quad S(R + L/2) = \infty$

$$V(s) = \frac{S(s)}{S(s) - s - L/2} \quad s = x - L/2$$

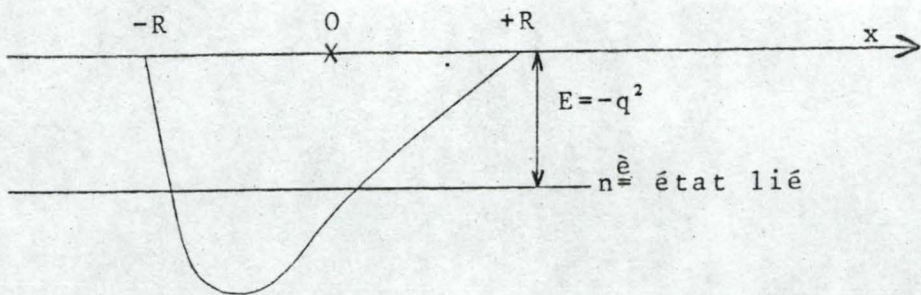
1er état lié pair existe toujours

$$\exists \text{ état lié impair} \Rightarrow \int_{-R}^{+R} |V(s)| (s+L/2) ds > 1$$

$$\int_{-R}^{+R} |V(s)| (s+L/2)^2 ds > R+L/2 \Rightarrow \exists \text{ état lié impair}$$

TABLEAU III.5. : N^{ème} état lié

$E \neq 0$
potentiel asymétrique



$$V(x) \neq V(-x)$$

$$V(x) = 0 \quad |x| \geq R$$

$$V(x) \leq 0 \quad |x| \leq R$$

$$u'' + Eu = Vu$$

$$u_1 = e^{qx} \quad u_2 = e^{-qx}$$

$$S' = \frac{V}{-2q} (e^{qx} + Se^{-qx})^2$$

$$E = -q^2 \quad q > 0$$

$$W = -2q$$

$$S(-R) = 0 \quad S(R) = \infty$$

$$\exists n \text{ pôles} \Rightarrow 1^\circ) U_1 \quad n \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi q} \sqrt{\int_{-R}^{+R} |V| e^{-2qx} dx \int_{-R}^{+R} |V| e^{2qx} dx}$$

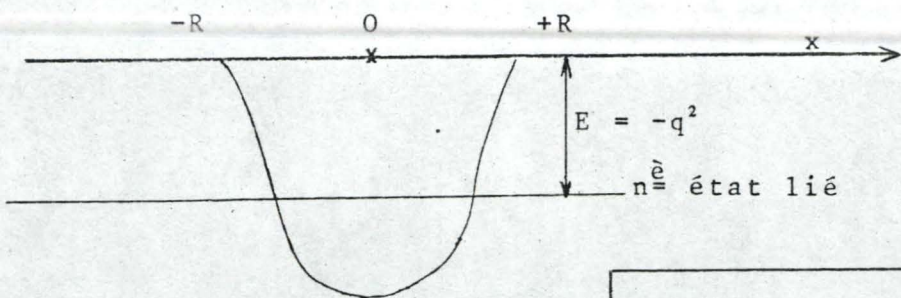
$$2^\circ) U_2 \quad n \leq 1 + \frac{1}{\pi q} \sqrt{\int_{-R}^{+R} |V| e^{-2qx} dx \int_{-R}^{+R} |V| e^{2qx} dx - \left(\int_{-R}^{+R} |V| dx \right)^2}$$

$$N = \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{e^{-2qR} \varphi(\mu)}{\beta} \right) + \frac{1}{\pi} \int_{-R}^{+R} \min_x \left(\frac{\varphi(\mu)}{\beta} 2q \cdot e^{2qx}, \frac{|V|}{2q} \frac{e^{-2qx}}{\varphi(\mu)} \right) dx \right\} \right\}$$

$$\Rightarrow n \leq N$$

TABLEAU III.6. : N^{ème} état lié

E ≠ 0
potentiel symétrique



$$V(x) = V(-x)$$

$$V(x) = 0 \quad |x| \geq R$$

$$V(x) \leq 0 \quad |x| \leq R$$

$$u'' + Eu = Vu$$

$$u_1 = e^{qx} \quad u_2 = e^{-qx}$$

$$S' = \frac{|V|}{2q} (e^{qx} + Se^{-qx})^2$$

$$E = -q^2 \quad q > 0$$

$$W = -2q$$

cas pair : $u'(0) = 0$

$$A(x) = S(x) - 1$$

$$A(0) = 0 \quad A(R) = \infty$$

$$A' = \frac{|V|}{2q} ((e^{qx} - e^{-qx}) + Ae^{-qx})^2$$

$$u_1 = e^{qx} - e^{-qx} \quad u_2 = e^{-qx}$$

cas impair : $u(0) = 0$

$$A(x) = S(x) + 1$$

$$A(0) = 0 \quad A(R) = \infty$$

$$A' = \frac{|V|}{2q} ((e^{qx} + e^{-qx}) + Ae^{-qx})^2$$

$$u_1 = e^{qx} + e^{-qx} \quad u_2 = e^{-qx}$$

En pôles \Rightarrow 1° U_1

$$n \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi q} \sqrt{\int_0^R |V| u_2^2 dx \cdot \int_0^R |V| u_1^2 dx}$$

2° U_2

$$n \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi q} \sqrt{\int_0^R |V| u_2^2 dx \int_0^R |V| u_1^2 dx - \left(\int_0^R |V| u_1 u_2 dx\right)^2}$$

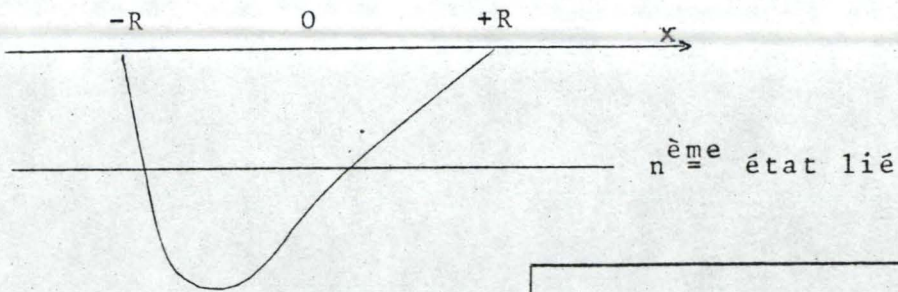
$$N = \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^R \min\left(2q \frac{\varphi(\mu)}{\beta} e^{2qx}, \frac{|V|}{2q} \frac{e^{-2qx\beta}}{\varphi(\mu)}\right) dx \right\} \right\} \Rightarrow n \geq N$$

$$N = \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{2\varphi(\mu)}{\beta} \right) + \frac{1}{\pi} \int_0^R \min\left(2q \frac{\varphi(\mu)}{\beta} e^{2qx}, \frac{|V|}{2q} \frac{e^{-2qx\beta}}{\varphi(\mu)}\right) dx \right\} \right\} \Rightarrow n \geq N$$

$$\frac{|V|}{2q} \frac{e^{-2qx\beta}}{\varphi(\mu)} dx \}} \Rightarrow n \geq N$$

TABLEAU III.7. : N^{ème} état lié

E = 0
potentiel asymétrique



$$V(x) \neq V(-x)$$

$$V(x) = 0 \quad |x| \geq R$$

$$V(x) \leq 0 \quad |x| < R$$

$$u'' = Vu$$

$$u_1 = x \quad u_2 = +1$$

$$S' = -V(x + S)^2$$

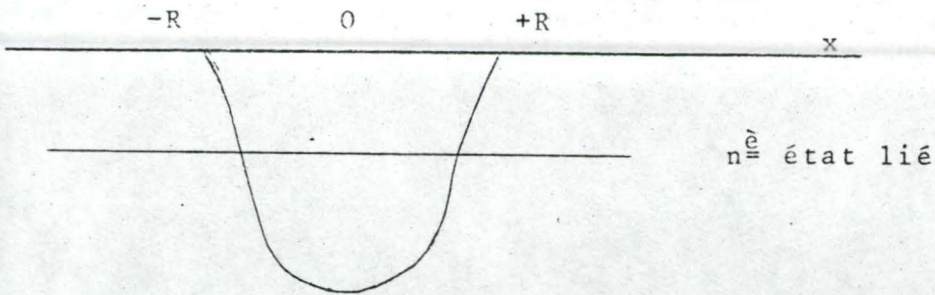
$$W = -1$$

$$S(-R) = 0 \quad S(R) = \infty$$

$\exists n \text{ pôles} \Rightarrow 1^\circ) U_1$	$n \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \sqrt{\int_{-R}^R V dx \int_{-R}^R V x^2 dx}$
$2^\circ) U_2$	$n \leq 1 + \frac{2}{\pi} \sqrt{\int_{-R}^R V dx \int_{-R}^R V x^2 dx - \left(\int_{-R}^R V x dx\right)^2}$
$N = \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{tg}^{-1} \left(-R \frac{\varphi'(R)}{\beta} \right) + \frac{1}{\pi} \int_{-R}^R \min \left(\frac{\varphi'(x)}{\beta}, V \frac{\beta}{\varphi(x)} \right) dx \right\} \right\} \Rightarrow n \leq N$	

TABLEAU III.8. : N^{ème} état lié

E = 0
potentiel symétrique



$$V(x) = V(-x)$$

$$V(x) = 0 \quad |x| \geq R$$

$$V(x) < 0 \quad |x| \leq R$$

$$u'' = Vu$$

$$u_1 = x \quad u_2 = 1$$

$$S' = |V| (x + S)^2$$

W = -1

cas pair : $u'(0) = 0$

cas impair : $u(0) = 0$

$$C(x) = -\frac{1}{S(x)} \quad C(0) = 0 \quad C(R) = 0$$

$$C' = |V| (1 - xC)^2$$

$$S(0) = 0 \quad S(R) = \infty$$

$\exists n$ pôles \Rightarrow 1°) U_1

$$n \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \sqrt{\int_0^R |V| dx \int_0^R |V| x^2 dx}$$

2°) U_2

$$n \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \sqrt{\int_0^R |V| dx \int_0^R |V| x^2 dx - \left(\int_0^R |V| x dx\right)^2}$$

$$N = \left\{ \left\{ \frac{\pi+1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^R \min\left(\frac{\varphi(\mu)}{\beta x^2}, \frac{x^2 |V| \beta}{\varphi(\mu)}\right) dx \right\} \right\} \Rightarrow n \geq N$$

$$N = \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^R \min\left(\frac{\varphi(\mu)}{\beta}, \frac{|V| \beta}{\varphi(\mu)}\right) dx \right\} \right\} \Rightarrow n \geq N$$

CHAPITRE IV. : CARACTERISATION DES BANDES DANS LE CAS D'UN POTENTIEL PERIODIQUE

1. INTRODUCTION

Dans le chapitre III, nous avons étudié le comportement du spectre pour un potentiel quelconque de portée finie. Nous allons voir ici le comportement de ce spectre dans le cas où le potentiel devient périodique sur $[-\infty, +\infty]$ dans le cas où $E \neq 0$ (tableau IV-1 et IV-3) et dans le cas où $E=0$ (tableaux IV-2 et IV-4).

Comme annoncé dans l'introduction, lorsque le potentiel devient périodique, les valeurs propres ne sont plus discrètes (états liés) mais sont situées à l'intérieur de bandes.

On trouvera dans le §2 les résultats suivants :

	CN et CS $1^{\text{ère}}$ bande	CN et CS $n^{\text{ème}}$ bande
$E \neq 0$	potentiel symétrique (tableau IV-1)	potentiel asymétrique (tableau IV-3)
$E = 0$	potentiel symétrique (tableau IV-2)	potentiel asymétrique (tableau IV-4)

Nous nous penchons sur les propriétés des extrémités de ces bandes dans les §3.

Et enfin, dans le §4, nous donnons quelques applications de nos résultats ($1^{\text{ère}}$ et $n^{\text{ème}}$ bande) ainsi que des points de comparaisons divers.

2. RECHERCHE DE CN ET CS A L'OBTENTION DE LA 1^{ère} ET DE LA N^{ème} BANDE

- a) Les résultats de la 1^{ère} colonne (tableaux IV-1 et IV-2) sont déterminés à partir de la théorie développée au chapitre I et résumée dans le tableau I-2.
- b) La méthode employée pour trouver une CN et une CS à l'obtention de la n^{ème} bande est développée ci-après et est en fait une application de l'annexe III.

Remarques :

Les remarques faites au chapitre III sur la parité des états liés et l'existence automatique du premier état lié pair à énergie nulle se transposent directement au cas du potentiel périodique symétrique.

La n^{ème} bande étant le n^{ème} intervalle de stabilité, nous nous attachons ici à caractériser successivement le n^{ème} intervalle de stabilité de :

$$y''(x) - \lambda V(x)y(x) = 0 \text{ (Energie nulle)}$$

$$y'' + [\lambda - V(x)]y(x) = 0 \text{ (Energie non nulle)}$$

- b1) Caractérisation des intervalles de stabilité pour $y''(x) - \lambda V(x)y(x) = 0$ [14]

Nous recherchons dans ce paragraphe les zones de stabilité des solutions de l'équation linéaire périodique :

$$y''(x) - \lambda V(x)y(x) = 0 \quad (4-1)$$

$$V(x) = V(x+L) \quad (4-2)$$

$$\lambda V(x) \leq 0$$

(voir annexe I)

Nous voulons caractériser l'intervalle de stabilité $]\lambda_{2n}, \lambda'_{2n+1}[$ (l'étude est identique pour $]\lambda'_{2n}, \lambda_{2n-1}[$ défini par :

$$y(x, \lambda) \text{ est borné } \Leftrightarrow \exists n : \lambda \in]\lambda_{2n}, \lambda'_{2n+1}[$$

$$(\lambda_0 = 0)$$

$$\text{On suppose que } y(0) = 0 \text{ et } y'(0) \neq 0 \quad (4-3)$$

En posant : $\Gamma(x) = \frac{y(x)}{y'(x)}$, on trouve :

$$\Gamma(x) = x + S(x)$$

en ayant choisi comme solutions de $y''(x) = 0$

$$u_1(x) = x$$

$$\text{et } u_2(x) = 1$$

Les conditions aux limites des problèmes donnant lieu à des solutions périodiques (de valeur propre λ_i ou λ'_i) se traduisent par (voir annexe I) : $S(0) = 0$ (4-4)
 $S(L) = -L$

Dans le but d'introduire un pôle en $x = L$, on fait la transformation homographique

$$A(x) = \frac{S(x)}{S(x) + L}$$

La fonction $A(x)$ satisfait l'équation de Riccati

$$A'(x) = \frac{\lambda V(x)}{L} [x + A(x)(L - x)]^2 \quad (4-5)$$

$$(4-6)$$

$$A(0) = 0 \quad A(L) = \infty$$

Pour caractériser λ_{2n} et λ'_{2n+1} , qui sont respectivement la $(2n-1)$ et la $(2n)$ ^e valeur propre du problème (4-6), on compte le nombre de pôles de la solution $A(x)$ dans l'intervalle $[0, L]$.

En conséquence,

λ appartient au $(n+1)^{\text{ème}}$ intervalle de stabilité $]\lambda_{2n}, \lambda'_{2n+1}[\Leftrightarrow A(x, \lambda)$ a au moins $2n$ pôles et au plus $2n+1$ pôles.

n et λ sont dès lors reliés entre eux, grâce aux résultats donnés dans l'annexe III :

$$\begin{cases} 2n \geq L(\lambda) \\ 2n+1 \leq U(\lambda) \end{cases} \quad (4-7)$$

Il nous reste maintenant à écrire L et U sous forme explicite (bornes U_1, U_2 et L). L'équation (A3-1) est ici l'équation de Riccati (4-6) et les solutions linéairement indépendantes u_i sont :

$$\begin{cases} u_1(x) = x \\ u_2(x) = L - x \end{cases}$$

Donc, $W = -L$ est négatif sur $[0, L]$

, la fonction $\frac{V(x)}{p(x)}$ correspondant à $+\lambda V(x)$ est négative.

On peut calculer la borne U .

En notant :

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_0^L \frac{\lambda|V(x)|}{L} (L-x)^2 dx \\ I_1 &= \int_0^L \frac{\lambda|V(x)|}{L} (L-x)x dx \\ I_2 &= \int_0^L \frac{\lambda|V(x)|}{L} x^2 dx \end{aligned}$$

La borne U_1 donne :

$$2n+1 \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \frac{\lambda}{L} \sqrt{\int_0^L |V(x)|(L-x)^2 dx \int_0^L |V(x)|x^2 dx} \quad (4-8)$$

Puisque I_1 est positive, U_2 donne :

$$2n+1 \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \frac{\lambda}{L} \left(\int_0^L |V(x)|(L-x)^2 dx \int_0^L |V(x)|x^2 dx - \left(\int_0^L |V(x)|x(L-x) dx \right)^2 \right)^{1/2}$$

(4-9)

On ne peut appliquer la borne U' car, $u_2(x)$ s'annulant en L , $f'(x)$ n'est pas bornée; $f(x)$ ayant une singularité au point $x = L$, la borne inférieure a la forme :

$$2n \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^L \min \left(\frac{\varphi(u)L}{\beta(L-x)^2}, \frac{|\lambda V(x)|(L-x)^2 \beta}{L \varphi(\mu)} \right) dx \right\} \right\}^{-1}$$

Si l'on choisit :

$$\begin{aligned} \mu &= \lambda \quad \text{et} \quad \varphi(\mu) = \sqrt{\mu} \\ \beta &= L \end{aligned}$$

La borne inférieure devient :

$$2n \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{\lambda}}{\pi} \int_0^L \min \left(\frac{1}{(L-x)}, |V(x)|(L-x)^2 dx \right) \right\} \right\}^{-1}$$

(4-10)

En résumé, les conditions (4-7) apparaissent explicitement :

$$\lambda_{2n} \leq \lambda \text{ implique } 2n+1 \geq \left\{ \left\{ \frac{1+\sqrt{\lambda}}{2+\pi} \int_0^L \min \left(\frac{1}{(L-x)^2}, |V(x)|(L-x)^2 \right) dx \right\} \right\}$$

et $\lambda \leq \lambda'_{2n+1}$ implique :

$$1^\circ \quad 2n+1 \leq \frac{1+2}{2+\pi} \frac{\lambda}{L} \sqrt{\int_0^L |V(x)|(L-x)^2 dx \int_0^L |V(x)|x^2 dx}$$

$$2^\circ \quad 2n+1 \leq 1 + \frac{2}{\pi} \frac{\lambda}{L} \left(\int_0^L |V(x)|(L-x)^2 dx \int_0^L |V(x)|x^2 dx - \left(\int_0^L |V(x)|x(L-x) dx \right)^2 \right)^{1/2}$$

b.2) Caractérisation des intervalles de stabilité pour $y''(x) + (\lambda - V(x))y(x) = 0$ [15]

La même étude peut se faire au sujet de l'équation linéaire périodique

$$y''(x) + (\lambda - V(x))y(x) = 0$$

$$V(x + L) = V(x)$$

$$V(x) \leq 0$$

(4-11)

Pour une valeur fixée de λ , la solution $y(x, \lambda)$ est bornée ssi il existe un entier n tel que :

$$\lambda \in]\lambda_{2n}, \lambda'_{2n+1}[\text{ ou }]\lambda'_{2n}, \lambda_{2n+1}[$$

De plus, nous supposons :

$$\lambda \text{ strictement négatif } (\lambda = -q^2, q > 0)$$

$$y(0) = 0 \quad y'(0) \neq 0$$

Les solutions de :

$$y''(x) + \lambda y(x) = 0$$

$$\text{sont dès lors : } \begin{cases} y_1(x) = e^{qx} \\ y_2(x) = e^{-qx} \end{cases}$$

Si l'on pose une fois de plus :

$$\Gamma(x) = \frac{y(x)}{y'(x)}, \text{ on obtient les conditions suivantes}$$

$$\text{sur } S : \begin{cases} S(0) = -1 \\ S(L) = -e^{+2qL} \end{cases}$$

La transformation homographique :

$$A(x) = \frac{S(x) + 1}{S(x) + e^{2qL}}$$

nous donne l'équation de Riccati.

$$A'(x) = \frac{V(x)}{2q(e^{2qL}-1)} \left(2\sinh qx + A(x)e^{qx}(e^{-2qx}e^{2qL}-1) \right)^2 \quad (4-12)$$

avec les conditions limites :

$$A(0) = 0 \text{ et } A(L) = \infty$$

Et ainsi, les intervalles de stabilité sont reliés aux pôles de $A(x)$ puisque :

λ appartient à la $n^{\text{è}}$ zone de stabilité



$A(x)$ a au moins $2n-1$ pôles et au plus $2n$ pôles.

Dès lors, n et λ sont reliés par les inégalités

$$(2n-1) \geq L(\lambda) \text{ et } 2n \leq U(\lambda) \quad (4-13)$$

(voir annexe III)

L'équation (A3-1) est dans ce cas (4-12) et les fonctions $u_i(x)$ sont :

$$u_1(x) = \sinh qx$$

$$u_2(x) = e^{qx}(e^{-2qx}e^{2qL}-1)$$

$$W(u_1, u_2) = q(1 - e^{2qL}) < 0$$

$$\text{et } \frac{V(x)}{p(x)} \equiv V(x) \leq 0$$

On a donc :

$$I_0 = \int_0^L \frac{|V(x)|}{2q(e^{2qL}-1)} e^{qx}(e^{-2qx}e^{2qL-1})^2 dx$$

$$I_1 = \int_0^L \frac{|V(x)|}{q(e^{2qL}-1)} \sinh(qx)e^{qx}(e^{-2qx}e^{2qL-1}) dx$$

$$I_2 = \int_0^L \frac{|V(x)|}{q(e^{2qL}-1)} \sinh^2(qx) dx$$

En vertu de (4-13), on peut donc écrire en explicitant U_1 , U_2 et L (en choisissant $\frac{\beta}{\varphi(x)} = 1$)

$$\lambda = -q^2 > \lambda_{2n} \Rightarrow 2n \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^L \min_x \left(\frac{2q(e^{2qL-1})}{e^{2qx}(e^{-2qx}e^{2qL-1})^2} \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \frac{|V(x)e^{2qx}(e^{-2qx}e^{2qL-1})^2}{2qL(e^{2qL}-1)} \right) dx \right\} \right\} \quad (4-14)$$

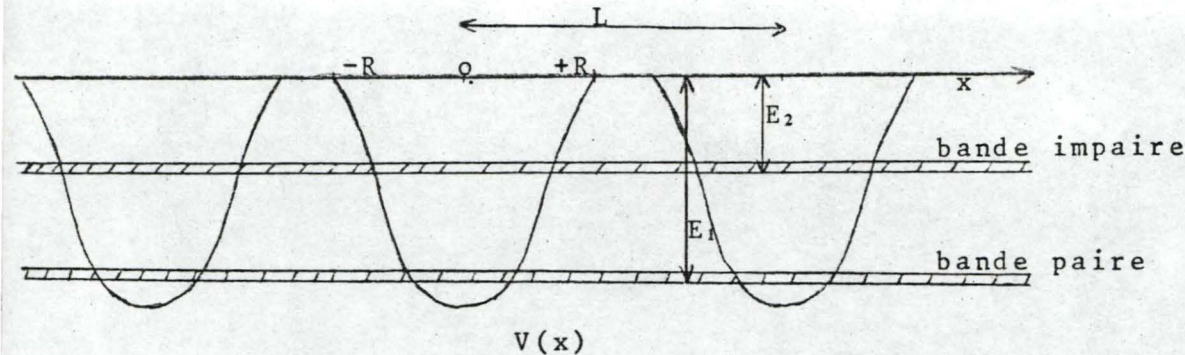
$$\lambda < \lambda'_{2n+1} \Rightarrow \begin{aligned} 1^\circ) \quad 2n < \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \sqrt{I_0 I_2} \\ 2^\circ) \quad 2n < 1 + \frac{2}{\pi} \sqrt{I_0 I_2 - I_1^2} \end{aligned} \quad (4-15)$$

Remarque :

Si l'on pose $\lambda = V(x) \equiv -\Delta V(x)$, on retrouve les résultats du paragraphe b1). (pour $\lambda \rightarrow 0$)

TABLEAU IV-1 : PREMIERE BANDE

$E \neq 0$
potentiel symétrique périodique



$$\begin{cases} V(x) = V(x + L) \\ V(x) = V(-x) \\ V(x) \leq 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} u'' + Eu &= Vu \\ u_1 &= e^{-qx} & u_2 &= e^{qx} \\ S' &= \frac{V}{2q} (e^{-qx} + Se^{qx})^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E &= -q^2 \quad (q > 0) \\ W &= 2q \end{aligned}$$

cas pair : $u(x) = u(-x)$
 $S(0) = +1$
 $S(L) = +e^{-2qL}$

cas impair : $u(x) = -u(-x)$
 $S(0) = -1$
 $S(L) = -e^{-2qL}$

\exists bande paire à énergie $E = E_1 \Rightarrow$

$$\frac{1}{1 - e^{-2qL}} \int_0^L |V(x)| e^{-qx} \frac{\cosh qx}{q} (1 + e^{2q(x-L)}) dx > 1 \quad (4-16)$$

$$\frac{1}{1 - e^{-2qL}} \int_0^L |V(x)| \frac{\cosh^2 qx}{q} dx > \frac{e^{qL} \cosh qL}{2} \Rightarrow$$

\exists bande paire à énergie $E = E_1$

\exists bande impaire à énergie $E = E_2 \Rightarrow$

$$\frac{1}{1 - e^{-2qL}} \int_0^L |V(x)| e^{-qx} \frac{\sinh qx}{q} (1 - e^{2q(x-L)}) dx > 1 \quad (4-17)$$

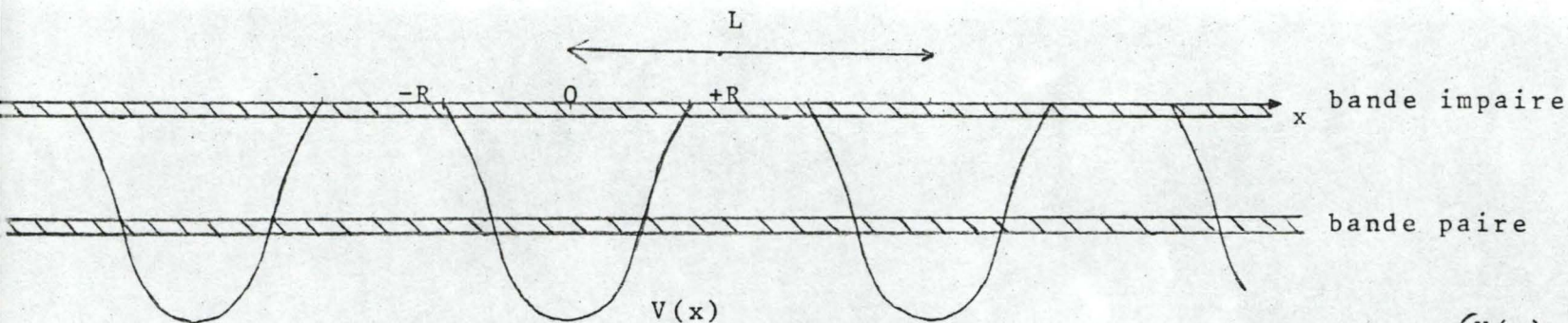
\exists tel que $\frac{2(1 - e^{-2q(t-L)})}{(1 - e^{-2qt})(1 - e^{-2qL})} \int_0^t |V(x)| \frac{\sinh^2 qx}{q} dx > 1 \Rightarrow$

\exists bande impaire à énergie $E = E_2$

Rem: si $L \rightarrow \infty$, on retrouve les CN et S à l'obtention de la 1ère bande impaire pour potentiel non répété.

TABLEAU IV-2 : PREMIERE BANDE

$E = 0$
potentiel symétrique périodique



$$\begin{cases} V(x) = V(x+L) \\ V(x) = V(-x) \\ V(x) \leq 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} u'' &= Vu \\ u_1 &= x & u_2 &= -1 \\ S' &= V(x - S)^2 \end{aligned}$$

$W = +1$

cas pair : $u(x) = +u(-x)$

cas impair : $u(x) = -u(-x)$

$S(0) = +\infty$

$S(L) = +\infty$

$S(0) = 0$

$S(L) = L$

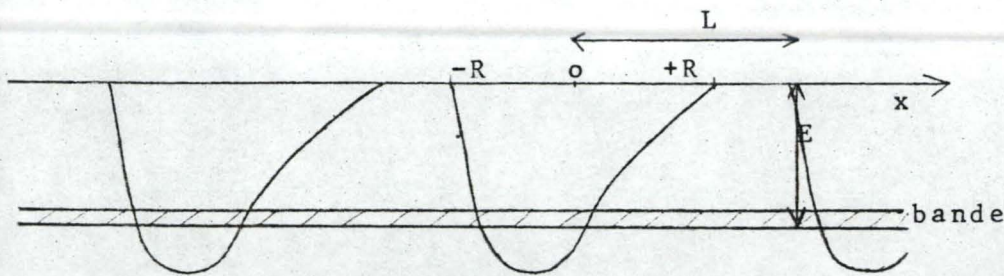
1ère bande paire existe toujours

$$\begin{aligned} \exists \text{ bande impaire} &\Rightarrow \int_0^L |V(x)| \left(1 - \frac{x}{L}\right) x dx > 1 \quad (4-18) \\ \exists t \text{ tq } \frac{L-t}{Lt} \int_0^t |V(x)| x^2 dx > 1 &\Rightarrow \exists \text{ bande impaire} \end{aligned}$$

Rem : Ces résultats sont ceux du tableau 4.II. lorsque $E = 0$

TABLEAU IV-3 : N^{ème} BANDE

$E \neq 0$
potentiel périodique



$$\begin{cases} V(x) = V(x+L) \\ V(x) \leq 0 \end{cases}$$

$$u'' + \lambda u = Vu$$

$$E = \lambda < 0 \\ = -q^2$$

$\lambda \in n^{\text{ème}}$ intervalle de stabilité

$$S' = \frac{V}{-2q} (e^{qx} + Se^{-qx})^2$$

$$\begin{aligned} S(0) &= -1 \\ S(L) &= -e^{2qL} \end{aligned}$$

$$\lambda \in] \lambda_{2n}, \lambda'_{2n+1} [$$

$$A = \frac{S + 1}{S + e^{2qL}}$$

$A(x)$ a au moins $2n-1$ pôles et
au plus $2n$ pôles

$$A'(x) = \frac{V(x)}{2q(e^{2qL}-1)} \left[2 \sinh qx + A e^{qx} (e^{2q(L-x)} - 1) \right]^2$$

$$A(0) = 0 \quad A(L) = 0$$

$$2n-1 \geq L(\lambda)$$

$$2n \leq U(\lambda)$$

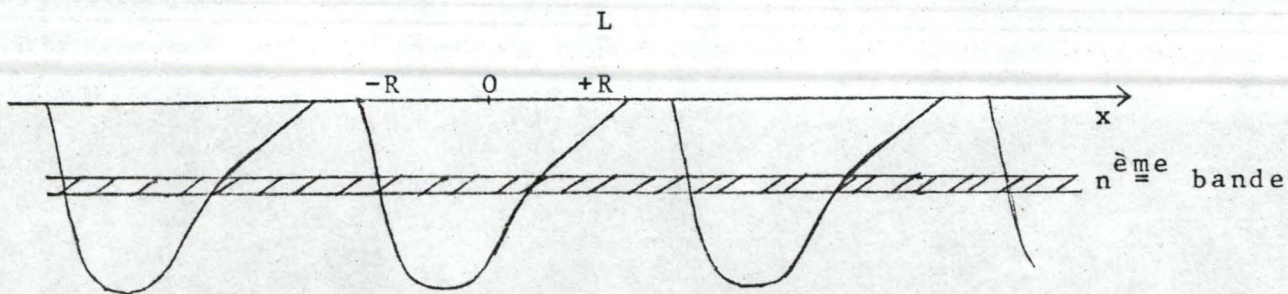
\Leftrightarrow

$$\lambda \geq \lambda_{2n} \Rightarrow 2n \geq \left\{ \left\lfloor \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^L \min \left(\frac{2q(e^{2qL}-1)}{e^{2qx}(e^{2q(L-x)}-1)^2}, \frac{V(x)e^{2qx}(e^{2q(L-x)}-1)^2}{2q(e^{2qL}-1)} \right) dx \right\rfloor \right\}$$

$$\lambda \leq \lambda'_{2n+1} \Rightarrow 2n \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \sqrt{I_0 I_2} \quad (\text{voir pp. : 46})$$

TABLEAU IV-4 : N^{ème} BANDE

E = 0
potentiel périodique



$$\begin{cases} V(x) = V(x + L) \\ V(x) \leq 0 \end{cases}$$

$$u'' = Vu$$

$$V \equiv \lambda V_*$$

$$V_* \leq 0 \text{ et } \lambda > 0$$

$\lambda \in n^{\text{ème}}$ intervalle de stabilité

$$S' = \frac{V}{-1} (x + S)^2$$

$$S(0) = 0$$

$$S(L) = -L$$

$$\lambda \in]\lambda_{2n}, \lambda'_{2n+1}[$$

$$A = \frac{S}{S + L}$$

$$A'(x) = \frac{\lambda V_*(x)}{L} (x + A(L-x))^2$$

$$A(0) = 0$$

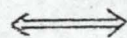
$$A(L) = \infty$$

A(x) a au moins 2n pôles et
au plus 2n+1 pôles

$$\lambda \geq \lambda_{2n} \Rightarrow 2n+1 \geq \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{\lambda}}{\pi} \int_0^L \min \left(\frac{1}{(L-x)^2}, |V_*|(L-x)^2 \right) dx \right\} - 1$$

$$\lambda \leq \lambda'_{2n+1} \Rightarrow 2n+1 \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \frac{\lambda}{L} \sqrt{\int_0^L |V_*|(L-x)^2 dx \int_0^L |V_*| x^2 dx}$$

$$\begin{aligned} 2n &\geq L(\lambda) \\ 2n+1 &\leq U(\lambda) \end{aligned}$$



3. POTENTIEL PERIODIQUE VERSUS EQUATION DIFFERENTIELLE A COEFFICIENTS PERIODIQUES

Dans le premier paragraphe, nous nous sommes attachés à trouver des CN et S à l'obtention de la première bande et de la n^{e} bande.

Ces bandes peuvent aisément être identifiées aux régions de stabilité des solutions de l'équation de HILL (traitée dans l'annexe I). ^{[15] [16] [17]}

Nous notons ici les résultats spécifiques aux bandes de solutions de l'équation de Schroedinger à potentiel périodique.

Les notations sont celles de l'annexe I.

Si l'on écrit :

$$\begin{aligned} q(x) &= q(x + \pi) \equiv V(x) && \text{(potentiel)} \\ \text{et } \lambda &= E && \text{(énergie)} \end{aligned}$$

l'équation de Schroedinger devient :

$$u''(x) + [\lambda - q(x)] u(x) = 0 \text{ (i) } (E = \lambda \neq 0) \quad (4-19)$$

$$u''(x) - \lambda q(x) u(x) = 0 \text{ (ii) } (E = 0)$$

qui, dans cas, est aussi appelée équation de Hill (i) ou de Lyapunoff (ii).

A1.

Les valeurs propres de l'équation de Hill (i) et de Lyapunoff (ii) (4-19) sont notées soit λ_i soit λ'_i et sont réparties de la façon suivante :

$$\lambda_0 < \lambda'_1 \leq \lambda'_2 < \lambda_1 \leq \lambda_2 < \lambda'_3 \leq \lambda'_4 < \lambda_3 \dots$$

Les λ_i et λ'_i correspondent donc aux extrémités des bandes.

De plus, les bandes (c'est-à-dire les intervalles de stabilité) sont déterminées par les intervalles

$$[\lambda_0, \lambda'_1]; [\lambda'_2, \lambda_1]; [\lambda_2, \lambda'_3]; \dots$$

A2.

De plus, les valeurs propres correspondent à des fonctions propres périodiques. Les λ_i donnent naissance à des solutions de période π tandis que les λ'_i correspondent à des solutions périodiques de période 2π .

A3.

Enfin, si le potentiel est une fonction paire, c'est-à-dire si :

$$q(x) = q(-x)$$

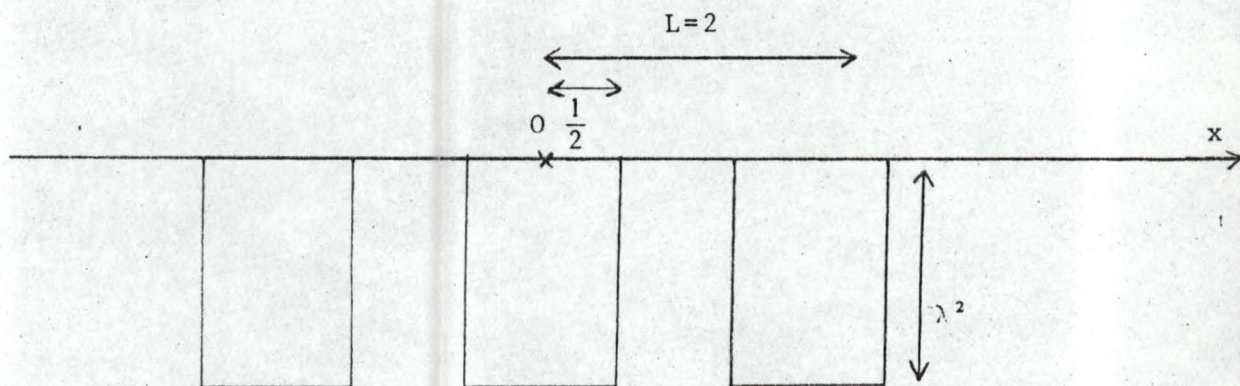
les valeurs propres correspondent à des solutions soit paires, soit impaires.

Application : ($E=0$)

Si l'on examine l'équation de Schroedinger avec comme potentiel :

$$V(x) \begin{cases} = -\lambda^2 & |x| \leq \frac{1}{2} \\ = 0 & \frac{1}{2} < |x| < 1 \end{cases}$$

$$V(x) = V(x+L) \quad L=2$$



[13] [15]

Les λ_i sont déterminés par l'équation

$$\cos\lambda - \frac{\lambda}{2} \sin\lambda = 1$$

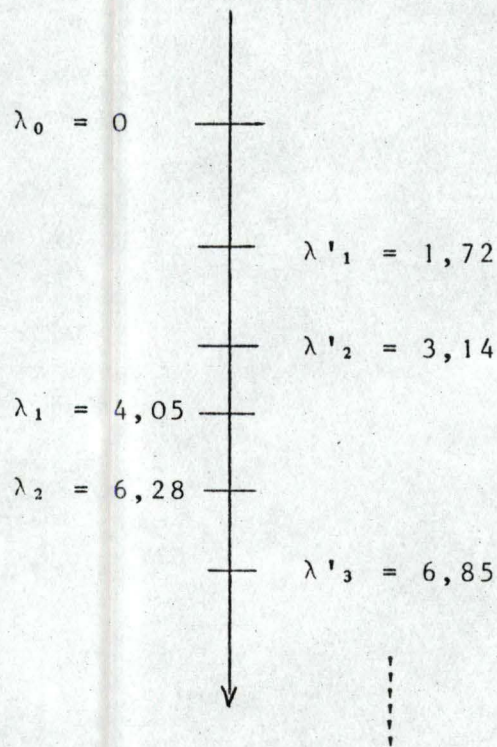
Les λ'_i sont déterminés par l'équation :

$$\cos\lambda - \frac{\lambda}{2} \sin\lambda = -1$$

Quant aux intervalles de stabilité, ils correspondent aux λ .

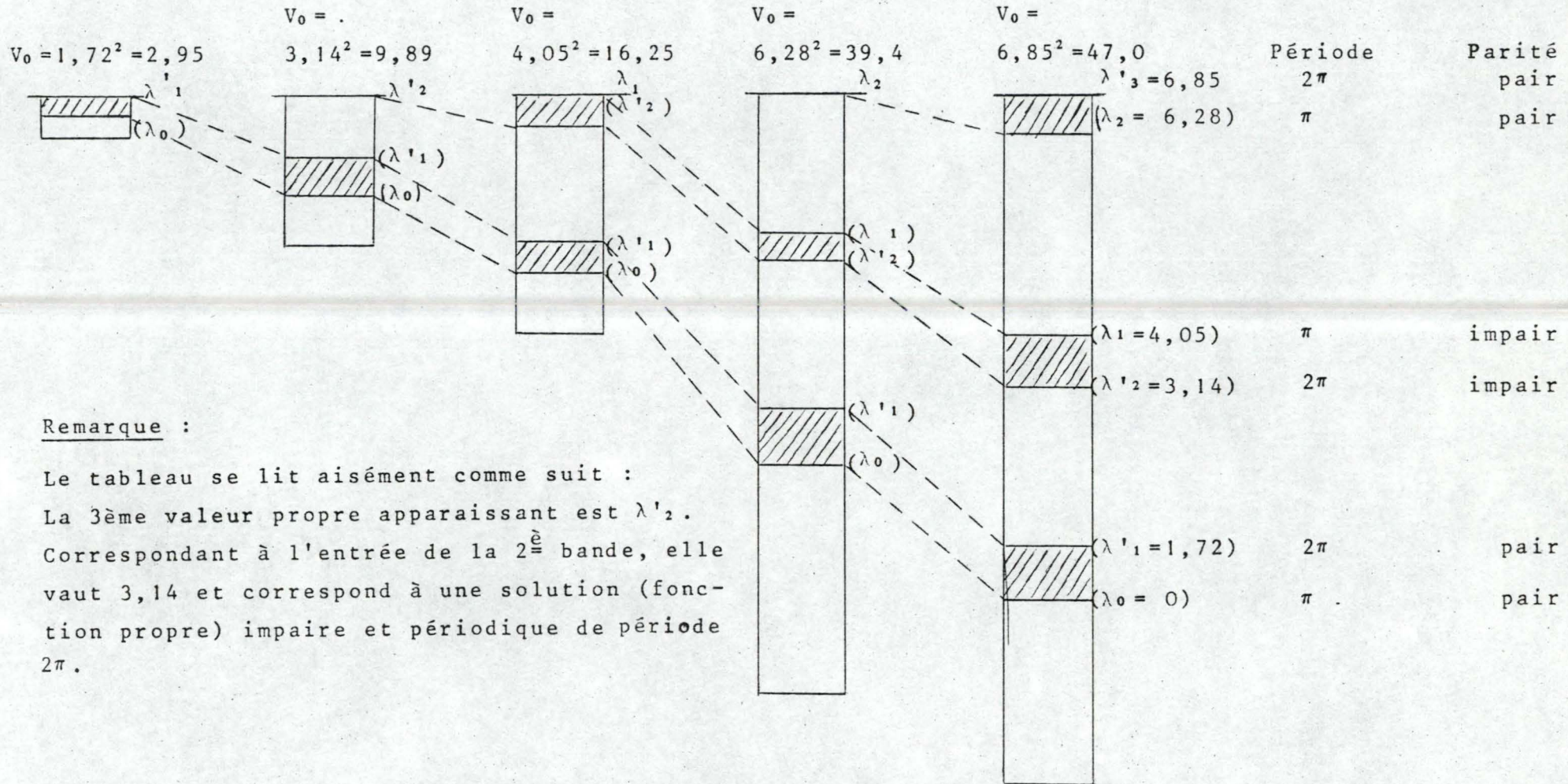
Vérifions : $-1 \leq \cos\lambda - \frac{\lambda}{2} \sin\lambda \leq 1$

c'est-à-dire,



Le tableau IV-5 indique l'apparition des niveaux correspondant aux λ critiques ainsi que les bandes déjà introduites dans le puit de potentiel.

TABLEAU IV-5 : APPARITION DES BANDES DANS UN POTENTIEL CARRE



Remarque :

Le tableau se lit aisément comme suit :
 La 3ème valeur propre apparaissant est λ'_2 .
 Correspondant à l'entrée de la 2^{ème} bande, elle
 vaut 3,14 et correspond à une solution (fonc-
 tion propre) impaire et périodique de période
 2π .

4. APPLICATIONS

a) L'équation de Mathieu est un cas particulier de l'équation de Hill et s'écrit :

$$u''(x) + [\lambda + \beta \cos 2x] u(x) = 0 \tag{4-20}$$

Nous nous attachons ici essentiellement à déterminer la première bande impaire à énergie nulle. Des points de comparaison nous seront donnés par Borg [annexe II]

L'existence de la première bande impaire revient à imposer :

$$\lambda'_2 \leq |\beta|$$

et donc $\lambda'_2 \leq |\beta| \Rightarrow$ (4-18). La contraposée de cette implication fournit le résultat :

$$|\beta| = 1,05 \Rightarrow \lambda'_2 \geq |\beta| \tag{4-21}$$

Borg, quant à lui, donne l'approximation suivante :

$$|\beta| < \pi \Rightarrow 1 - \frac{1}{\pi} \leq \sqrt{\lambda'_2} \leq 1 + \frac{1}{\pi} \tag{4-22}$$

La valeur approximative de λ'_2 est donnée par [17]

$$\lambda'_2 = 1 + \frac{\beta}{2} - \frac{\beta^2}{4(9-\lambda - \frac{\beta^2}{4(25-\lambda - \dots)}} \tag{4-23}$$

(fraction continue)

Application numérique :

soit $\beta = 1$

bornes de Borg $\Rightarrow 1,71 \geq \lambda'_2 \geq 0,48$

valeur approximée $\Rightarrow \lambda'_2 \approx 1,469$
 nos bornes $\Rightarrow \lambda'_2 \geq 1$

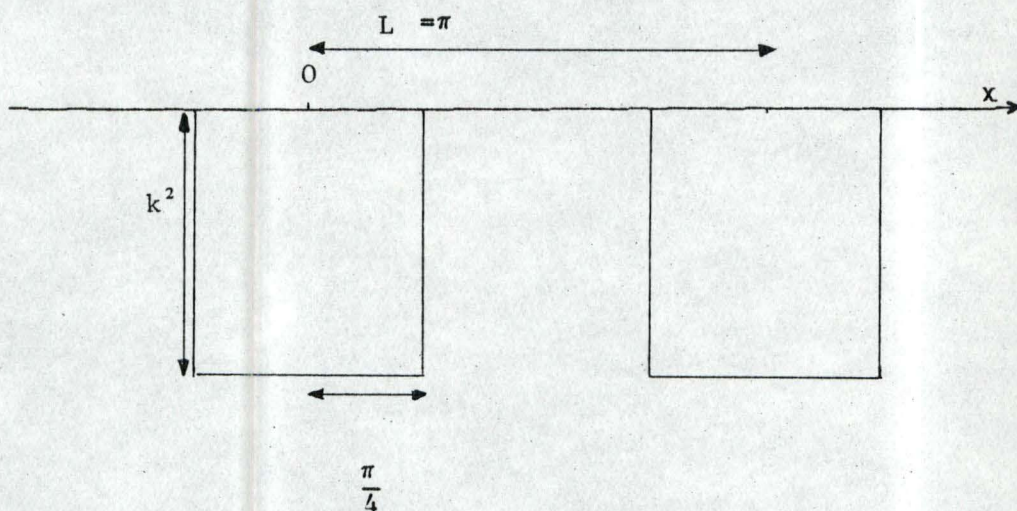
b) Potentiel carré

Considérons l'équation de Schroedinger avec potentiel $V(x)$ périodique de la forme :

$$V(x) = -k^2 \quad \text{pour } |x| \leq R = \frac{\pi}{4}$$

$$= 0 \quad \text{pour } \frac{\pi}{4} < |x| < \frac{\pi}{2}$$

$$V(x) = V(x + \pi)$$



b1) Potentiel carré à énergie non nulle

Dans une première partie, nous examinons ce cas à énergie non nulle. Les bornes (4-16) et (4-17) donnent une borne sur la valeur propre correspondant respectivement à l'entrée de la première bande paire et à l'entrée de la première bande impaire.

Si on note $E = -q^2$,

l'implication (4-16) donne :

$$\lambda_0 \leq -q^2 \Rightarrow \left\| \frac{k^2}{q^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{\pi q}{4} - \frac{e^{-q\pi}}{2} + \frac{e^{-3q\pi}}{2} \right] \right\|$$

$$\left\| \left[+ \frac{e^{-2q\pi}}{2} \left(\frac{\pi q}{2} - 1 \right) \right] \right\| \geq 1 - e^{-2q\pi} \quad (4-25)$$

l'implication (4-17) contraposée donne :

$$\left\| \frac{k^2}{q^2} \left[-\frac{1}{2} + \frac{\pi q}{4} + \frac{1}{2} \left(e^{-2q\pi} - e^{-\frac{3q\pi}{2}} + e^{-\frac{q\pi}{2}} \right) + \frac{\pi q}{4} e^{-2q\pi} \right] \right\| \leq 1 - e^{-2q\pi} \Rightarrow \lambda'_2 \geq -q^2 \quad (4-26)$$

Le théorème de Borg donne pour le résultat (4-26)

$$\left\| k^2 < 4 \Rightarrow 1 - \frac{k^2}{2} + \frac{k^4}{16} \leq \lambda'_2 \leq 1 + \frac{k^2}{2} + \frac{k^4}{16} \right. \quad (4-27)$$

Application numérique :

Soit $q = 1$; ramenons le potentiel à moyenne nulle (Cfr annexe II)

$$\text{nos bornes} \Rightarrow k^2 \leq 2,9 \Rightarrow \lambda'_2 \geq \frac{k^2}{2} - 1$$

$$\text{bornes Borg} \Rightarrow k^2 \leq 4 \Rightarrow \lambda'_2 \geq 1 - \frac{k^2}{2} + \frac{k^4}{16}$$

soit $k^2 = 2,5$

on obtient nos bornes $\lambda'_2 \geq 0,25$

bornes Borg $\lambda'_2 \geq 0,15$

b2) Potentiel carré à énergie nulle

.....

Examinons maintenant le même problème mais à énergie nulle cette fois. La première bande paire existant toujours à énergie nulle, nous nous attachons seulement à déterminer l'entrée de la première bande impair

(4-18) donne :

$$\lambda'_2 \leq \frac{k^2}{2} \Rightarrow k^2 \geq 1,4 \quad (4-28)$$

Borg donne, pour la même valeur propre, le résultat suivant :

$$k^2 < 4 \Rightarrow 1 - \frac{k^2}{4} \leq \sqrt{\lambda'_2} \leq 1 + \frac{k^2}{4} \quad (4-29)$$

Application numérique

Soit $k^2 = 1,4$

bornes Borg $\Rightarrow 0,425 \leq \lambda'_2 \leq 1,825$

nos bornes $\Rightarrow 0,7 \leq \lambda'_2$

Remarques :

- 1° Nos bornes sont meilleurs. Cependant, contrairement à Borg, on obtient une majoration que d'un seul côté.
- 2° La 1^{ère} bande paire existant automatiquement, nous n'obtenons, tout comme Borg, aucune indication sur la valeur de λ_0 .

ANNEXE I. : L'EQUATION DE HILL ET EQUATION DE
 LYAPUNOFF [15] [19] [23]

A) L'équation de Hill est de la forme

$$y''(x) + [\lambda + q(x)] y(x) = 0 \quad (A1-1)$$

où λ est un paramètre et où $q(x)$ est une fonction réelle périodique en x et de période π .

De plus, on suppose $q(x)$ borné et dérivable par morceaux.

Supposons que $y_1(x)$ et $y_2(x)$ soient deux solutions linéairement indépendantes de (A1-1). Ces deux solutions sont déterminées de façon unique par les conditions :

$$y_1(0) = 1, y'_1(0) = 0, y_2(0) = 0, y'_2(0) = 1$$

Comme les solutions de (A1-1) sont fonction de λ , on notera $y_1(x, \lambda)$ et $y_2(x, \lambda)$.

a) Un théorème du à Lyapunoff et Haupt nous donne les résultats suivants : [20] [21] [22]

1° A toute équation différentielle (A1-1) sont associées 2 suites infinies, croissantes et monotones de nombres réels

$$\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots$$

$$\lambda'_1, \lambda'_2, \dots$$

- tels que (A1-1) a une solution de période π ssi $\lambda = \lambda_n$ ($n=0, 1, 2, \dots$)

- tels que (A1-1) a une solution de période 2π ssi $\lambda = \lambda'_n$ ($n=1, 2, \dots$)

2° Les λ_n et λ'_n satisfont les inégalités

$$\lambda_0 < \lambda'_1 \leq \lambda'_2 < \lambda_1 \leq \lambda_2 < \lambda'_3 \leq \lambda'_4 < \lambda_3 \dots$$

(A1-2)

3° Les solutions sont stables (c'est-à-dire bornées $\forall x$) dans les intervalles (λ_0, λ'_1) , (λ'_2, λ_1) , (λ_2, λ'_3) , ...

4° Les λ_n sont les racines de l'équation

$$\Delta(\lambda) = 2$$

et les λ'_n sont les racines de l'équation

$$\Delta(\lambda) = -2$$

$$\text{où } \Delta(\lambda) = y_1(\pi, \lambda) + y'_2(\pi, \lambda)$$

b) Si $q(x)$ est symétrique, $q(x) = q(-x)$

et dans ce cas, les solutions périodiques peuvent être choisies soit paires, soit impaires. Plus précisément, (A1-1) admet une solution périodique

- de période π et paire ssi $y'_1\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$
- de période π et impaire ssi $y_2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$
- de période 2π et paire ssi $y_1\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$
- de période 2π et impaire ssi $y'_2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$

c) Définition : [16] [17] [24] [25]

Si, dans l'équation (A1-1), $q(x) = \beta \cos 2x$, l'équation de Hill est appelée équation de Mathieu.

On peut déterminer 4 types de solutions périodiques de l'équation de Mathieu :

$$-ce_{2n}(x) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2n, 2r} \cos 2rx$$

est une solution paire, de période π , de valeur propre λ_{2n}

$$-se_{2n}(x) = \sum_{r=1}^{\infty} B_{2n, 2r} \sin 2rx$$

est une solution impaire, de période π , de valeur propre λ_{2n-1}

$$-ce_{2n+1}(x) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2n+1, 2r+1} \cos (2r + 1)x$$

est une solution paire, de période 2π , de valeur propre λ_{2n+1}

$$-se_{2n+1}(x) = \sum_{r=0}^{\infty} B_{2n+1, 2r+1} \sin(2r + 1)x$$

est une solution impaire, de période 2π , de valeur propre λ_{2n+2}

On peut aisément déterminer les valeurs propres correspondant à ces fonctions propres et de là, les coefficients $A_{i, j}$ et $B_{i, j}$ qui assureront la convergence de ces séries.

Exemple :
○○○○○○○

Pour $se_1(x)$, par exemple, on obtient les relations suivantes :

$$\frac{d^2}{dx^2} se_1(x) + [\lambda'_2 + \beta \cos 2x] se_1(x) = 0$$

$$\lambda'_2 = 1 + \frac{\beta}{2} \cfrac{\beta^2}{4(9-\lambda - \cfrac{\beta^2}{4(25-\lambda \dots))}}$$

(fraction continue)

$$se_1(x) = \sin x + \frac{\beta}{16} \sin 3x + \frac{\beta^2}{4} \left[\frac{1}{192} \sin 5x + \frac{1}{64} \sin 3x \right.$$

$$\left. - \frac{1}{128} \sin x \right] - \frac{\beta^3}{8} \left[\frac{1}{9.2^{10}} \sin 7x + \frac{1}{9.2^7} \sin 5x \right.$$

$$\left. - \frac{1}{3.2^{10}} \sin 3x - \frac{1}{2^9} \sin x \right] + O(\beta^4)$$

Le diagramme suivant montre les zones de stabilité (en gris) et d'instabilité en fonction de λ et β . Les courbes délimitant les zones correspondent aux solutions périodiques : [26]

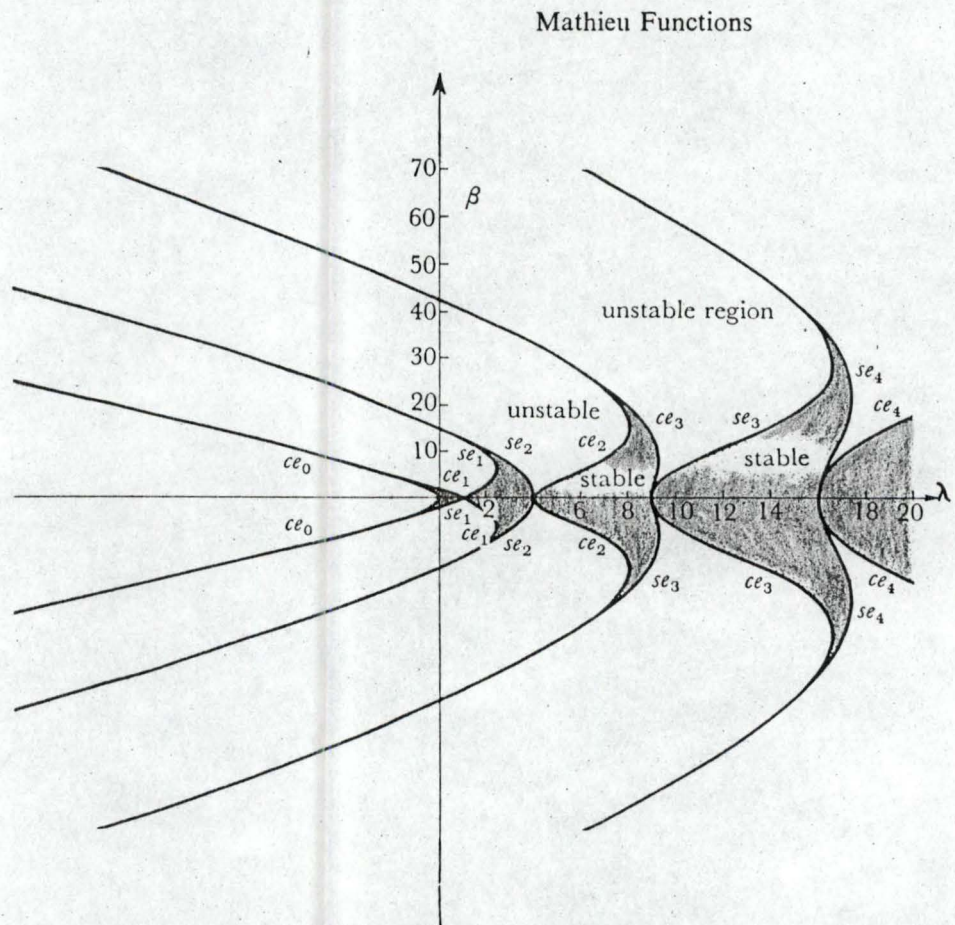


Figure 7-5 The $\lambda\beta$ plane showing the character of the solutions of the Mathieu equation for different values of λ and β

Si on examine le diagramme pour β fixé (// à l'axe des λ), on retrouve la gradation des λ_i et λ'_i annoncée plus haut.

En effet, ce_0 a pour valeur propre λ_0
 ce_1 a pour valeur propre λ'_1
 se_1 a pour valeur propre λ'_2
 se_2 a pour valeur propre λ_1
 \vdots
 et on retrouve bien (A1-2)

B) Si l'on examine l'équation de Lyapunoff^[23]

$$\boxed{y''(x) + \lambda q(x)y(x) = 0} \quad (A1-3)$$

$$\text{avec } q(x) = q(x + \pi)$$

$$\lambda q(x) \geq 0$$

et si l'on suppose $q(x)$ bornée et dérivable par morceaux, on obtient des résultats apparentés à ceux de Hill. En effet, Lyapunoff a montré que cette équation donne existence à une suite infinie de nombres λ_i et λ'_i tels que : [27]

$$1^\circ \quad (0 <) \lambda'_1 \leq \lambda'_2 < \lambda_1 \leq \lambda_2 < \lambda'_3 \leq \lambda'_4 \dots$$

avec λ'_i valeurs propres du problème

$$\left\{ \begin{array}{l} y''(x) + \lambda q(x)y(x) = 0 \\ y(0) = -y(L) \\ y'(0) = -y'(L) \end{array} \right. \quad (\text{solution périodique de période } 2L)$$

et avec λ_i valeurs propres du problème

$$y''(x) + \lambda q(x)y(x) = 0$$

$$y(0) = y(L)$$

$$y'(0) = y'(L)$$

(solution périodique de période L)

2° Pour λ fixé et positif, les solutions $y(x, \lambda)$ sont stables

$$\text{ssi } \lambda \in [\lambda_{2n}, \lambda'_{2n+1}] \text{ ou } [\lambda'_{2n}, \lambda_{2n-1}]$$

(à condition que l'intervalle ne soit pas réduit à 1 point).

Remarques :

oooooooo

Les résultats sont identiques à ceux tirés de Hill. Il faut cependant noter le rôle différent de λ dans (A1-1) et (A1-3).

Le théorème de Borg s'applique aux équations de Hill (les notations employées seront donc celles employées dans l'annexe I.)

Si, dans l'équation de Hill :

$$y''(x) + [\lambda + q(x)] y(x) = 0$$

$q(x)$ est périodique de période π et

$$\text{est tel que } \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} |q(x)| dx = A$$

$$\text{est tel que } \int_0^{\pi} q(x) dx = 0 \quad (\text{A2-1})$$

Alors, pour tout entier $n > \frac{A}{2}$

$$|\sqrt{\lambda_{2n-1}} - 2n| \leq \frac{A}{4n}$$

$$|\sqrt{\lambda_{2n}} - 2n| \leq \frac{A}{4n}$$

$$|\sqrt{\lambda'_{2n-1}} - 2n+1| \leq \frac{A}{4n-2}$$

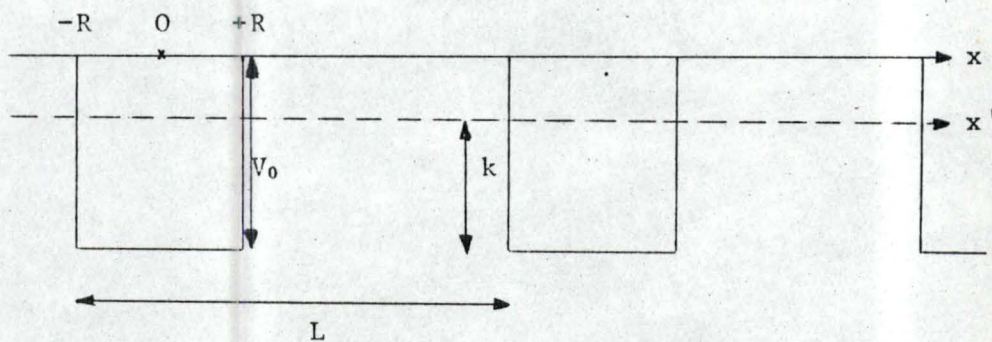
$$|\sqrt{\lambda'_{2n}} - 2n+1| \leq \frac{A}{4n-2}$$

Remarques :

- 1° D'une manipulation assez aisée, ce théorème ne donne malheureusement aucune indication sur λ_0 .
- 2° Dans ce mémoire, la condition (A2-1) n'est pas imposée. Il est donc nécessaire d'effectuer un changement d'axes horizontal pour comparer les différents résultats obtenus.

Dans le cas du potentiel carré, par exemple, analysons les diverses étapes qui nous permettront de comparer les résultats obtenus.

- 1) Suivant nos conditions, le potentiel carré a la forme suivante :



- 2) Pour vérifier la condition (A2-1) du théorème de Borg, il faut effectuer un déplacement d'axe horizontal. (en pointillé sur le graphe).

La valeur de k vérifiant (A2-1) est :

$$k = V_0 \left(\frac{\pi - 2R}{\pi} \right)$$

Dans le cas particulier où $R = \frac{\pi}{4}$, on obtient :

$$k = \frac{V_0}{2} \quad \text{et} \quad A = \frac{V_0}{2}$$

Le théorème de Borg est applicable

- 3) Encore faut-il établir la correspondance entre nos résultats (établis sur base de l'axe Ox) et les résultats de Borg (établis sur base de l'axe Ox').

Le potentiel étant déplacé verticalement de $V_0 - k$, il en sera de même des valeurs propres.

La relation :

$$\lambda = \lambda_{\text{Borg}} + V_0 - k$$

permet de comparer aisément nos résultats et ceux de Borg.

ANNEXE III. : BORNES SUPERIEURES ET INFERIEURES AU
NOMBRE DE POLES D'UNE EQUATION DE
RICCATI [4]

Si l'on considère l'équation différentielle du 2^è
ordre,

$$(p(x) u'(x))' + r(x) u(x) = V(x) u(x) \quad (A3-1)$$

et si l'on suppose :

$$\left\{ \begin{array}{ll} p(x) > 0 & \text{sur }]a, b[\\ V(x) \leq 0 & \text{sur }]a, b[\\ 0 \leq a < b \\ V(x), r(x), p(x) \text{ et } p'(x) \text{ sont continues par mor-} \\ & \text{ceaux sur }]a, b[\end{array} \right.$$

On sait [chapitre I] qu'on peut associer à ce pro-
blème une équation de Riccati appelée équation de pha-
se :

$$S'(x) = \frac{V(x)}{p(x) W(x)} (u_1(x) + S(x) u_2(x))^2 \quad (A3-2)$$

où $u_1(x)$ et $u_2(x)$ sont 2 solutions linéairement indé-
pendantes de (A3-1) lorsque $V(x) \equiv 0$

$$\begin{aligned} u(x) &= C_1(x) u_1(x) + C_2(x) u_2(x) \\ S(x) &= \frac{C_2(x)}{C_1(x)} = \text{phase} \quad S(a) = 0 \end{aligned}$$

$$W(x) = u_1(x) u_2'(x) - u_1'(x) u_2(x) < 0$$

(choix adéquat des u_i)

Nous allons maintenant donner des bornes supérieures
et inférieures au nombre de pôles de $S(x)$. Pour rappel,
un pôle de $S(x)$ correspond à une solution de l'équation
(A3-1).

On trouvera dans [3] le développement de la théorie qui conduit aux résultats suivants :

A) Borne supérieure du nombre de pôles de la phase

A1 : 1^{er} type de bornes supérieures

On pose

$$f(x) = \frac{u_1(x)}{u_2(x)}$$

$$I_0 = \int_a^b \frac{V(x)}{p(x) W(x)} u_2^2(x) dx$$

$$I_1 = \int_a^b \frac{V(x)}{p(x) W(x)} u_2^2(x) f(x) dx \quad (A3-3)$$

$$I_2 = \int_a^b \frac{V(x)}{p(x) W(x)} u_2^2(x) f^2(x) dx$$

Première borne supérieure générale

$$U \quad \left[n \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{tg}^{-1} \alpha + \frac{2}{\pi} \left(\sqrt{I_0 I_2 (1 + \alpha^2)} - \alpha I_1 \right) \right]$$

(avec α paramètre positif arbitraire)

Deux choix particuliers de α fournissent respectivement :

$$U_1 \quad \left[n \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \sqrt{I_0 I_2} \right] \quad (A3-4)$$

$$U_2 \quad \left[n \leq 1 + \frac{2}{\pi} \sqrt{I_0 I_2 - I_1^2} \right] \quad (A3-5)$$

(la borne U_2 est applicable à condition que $f(x) \geq 0$)

A2 : 2^{ème} type de bornes supérieures

$$\text{Si l'on pose } h(x) = \frac{V(x)}{p(x) W(x)} u_2^2(x)$$

et si les conditions suivantes sont vérifiées sur
[a, b]

- (I) $f(x)$ finie
- (II) $f'(x)$ bornée ($f'(x) \leq F$)
- (III) $h'(x)$ existe et ≤ 0
- (IV) $[h(x)]^{1/2}$ intégrable

On obtient un nouveau type de borne :

Si $f(a) \leq 0$:

$$U'_1 \quad n \leq \frac{2}{\pi} \sqrt{F} \int_a^b \left(\frac{V(x) u_2^2(x)}{p(x) W(x)} \right)^{\frac{1}{2}} dx \quad (A3-7)$$

Si $f(a) > 0$:

$$U'_2 \quad n \leq \frac{2}{\pi} \sqrt{F} \int_a^b \left(\frac{V(x) u_2^2(x)}{p(x) W(x)} \right)^{\frac{1}{2}} dx + 1 \quad (A3-8)$$

B) **Borne inférieure du nombre de pôles de la phase**

On suppose que $f(x) < \infty$

$$a \leq x \leq b$$

On obtient une borne inférieure L

$$L \quad n \geq \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{\varphi(\mu) f(a)}{\beta} \right) + \frac{1}{\pi} \int_a^b \min \left(\frac{\varphi(\mu)}{\beta} f'(x), \frac{V(x)}{p(x) W(x)} \frac{u_2^2(x)}{\varphi(\mu)} \right) dx \right\}$$

(A3-9)

avec μ, β paramètres arbitraires positifs

$\varphi(\mu)$ fonction arbitraire finie.

Pour un choix particulier de μ et de $\varphi(\mu)$, la borne
L devient :

$$L_1 \quad n \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{\gamma \frac{1}{2} f(a)}{\beta} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. \frac{1}{\pi} \sqrt{\gamma} \int_a^b \min_x \left(\frac{f'(x)}{\beta}, \frac{V(x) u_2^2(x) \beta}{p(x) W(x)} \right) dx \right\} \right\}$$

(A3-10)

Remarque :

.....

La notation ^[3] $\{ \{ a \} \}$ signifie "partie entière de a".

CONCLUSIONS ET EXTENSIONS

Le domaine d'application des méthodes employées, tant dans le cas non périodique que dans le cas périodique est très large ^[30] et dépasse le cadre de l'équation de Schroedinger comme l'expose en détail le travail parallèle déjà signalé [4]

Signalons toutefois les problèmes de physique mathématique qui pourraient être traités par la même approche.

- a) L'étude de l'équation de Schroedinger avec un dipôle comme potentiel serait un prolongement intéressant du chapitre II.
- [31]
- b) Dans le cas de potentiel périodique, seules les extrémités des bandes sont caractérisées. Il serait intéressant de déterminer à l'égal de Hund pour un "potentiel Dirac", une équation transcendante caractérisant les valeurs comprises à l'intérieur de la bande.
- c) Si le potentiel est un motif formé de plusieurs distributions delta, une extension aisée du ch II nous conduirait à la détermination du spectre de l'équation de Schroedinger.

De plus, une équation de phase scalaire peut être écrite pour un système linéaire d'équations différentielles du 1^{er} ordre (2x2) et également pour un système différentiel matriciel de dimension quelconque d'ordre 2 ^[32]

Les bornes obtenues dans ce travail doivent probablement s'étendre au moins partiellement à l'équation de Dirac (système du 1^{er} ordre de dimension 2) ou à l'équation de Schroedinger à plusieurs particules (système différentiel d'ordre 2 et de dimension quelconque).

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] RONVEAUX A., American Journal of Physics, Vol. 37
n°2, pp. : 135-141, (1969)
- [2] RONVEAUX A., C.R. Ac. Sci. Paris, 266, pp.:306-308, (1968)
- [3] CALOGERO F., "Variable phase approach to potential
scattering", Academic Press (1967)
- [4] RONVEAUX A., DUMONT M-C., HABAY J., "Counting the
poles of the solution of a general Riccati
equations"
publication interne FNDP (1975)
- [5] DURAND E., "Mécanique quantique", tome I, Masson et
Cie (1970)
- [6] SCHIFF L., "Quantum Mechanics", Mac Graw Hill, (1955)
- [7] RONVEAUX A., "Even and odd spectra of one dimensional
Symmetrical Potential.I" American Journal
of Physics, 40, n°6, pp.:888-892(1972)
- [8] RONVEAUX A., "Generalized delta function model"
Facultés Universitaires N.D. Paix -
Namur
- [9] RONVEAUX A., C.R. Ac. Sci. Paris, 270, pp.:621-624, (1970)
- [10] HUND F., "Theorie des Aufbaues der Materie"
Verlagsgesellschaft, (1961)
- [11] RORRES CHRIS., "Transmission coefficient and eigen-
values of a finite one-dimensional crys-
tal", SIAM, J. appl. Math; Vol 27,2,
sept 74, pp. 318-320 (1974)
- [12] RONVEAUX A., International Congress of Mathematicians,
Vancouver (1974)
- [13] RONVEAUX A., "Comparative properties of the single,
double and periodic potentials ", Lett.
Al. N. Cimento, 2, 10, pp. 523-528 (1974)

- [14] LYAPUNOFF A., C.R. Ac. Sci. PARIS, 128, 910 (1899)
- [15] MAGNUS W. and WINKLER S., "Hill's equation",
Interscience (1966)
- [16] ARSCOTT F.M., "Periodic differential equations",
Pergamon (1964)
- [17] MEIXNER J. et SCHÄFKE F.W., "Mathieusche Funktionen
und sphäroidfunktionen", Springer-Verlag, pp. 105-126 (1954)
- [18] GOL'DMAN et KRIVCHENKOV V., "Problem in quantum
Mechanics" (1961)
- [19] HOCHSTADT H., "The functions of Mathematical Physics"
Wiley - Interscience (1971)
- [20] HAUPT O., "Über lineare homogene Differentialgleichungen
2. Ordnung mit periodischen Koeffizienten", Mat. Ann, 79, 278-285 (1919)
- [21] HAUPT O., "Über eine Methode zum Beweis von Oszillationstheoremen", Math Ann, 76, 67-104
(1914)
- [22] LYAPUNOFF A., "Problème général de la stabilité du
mouvement", ANN. FAC. SCI. UNIV.
Toulouse (2), 9, 203-474
Repr. Princeton Univ. Press (1907)
- [23] ERUGIN N.P., "Linear systems of ordinary differential
equations", Academic Press (1966)
- [24] CAMPBELL R., "Théorie générale de l'équation de
Mathieu", Masson et Cie (1955)
- [25] STOKER J.J., "Nonlinear vibrations", Interscience,
(1950)
- [26] MATHEWS J. and WALKER R. : "Mathematical methods of
physics", W.A. Benjamin, (1970)

- [27] KREIN M.S. : "On certain problems on the maximum and minimum characteristic valeurs and on the Lyapunoff zones of stability", Ann. Math. Soc. Transl. 2,1, 163 (1955)
- [28] BORG S., "Uber die Stabilität gewisser Klassen von linearen Differentialgleichungen", Ark. Mat. Astr. Fys, 31a, N°1, pp. 1-3 (1944)
- [29] BORG S., "Eine Umkehrung des Sturm-Liouvilleschen Eigenwerte", Acta Math., 78, 1-96 (1946)
- [30] EASTHAM M.S.P., "The spectral theory of periodic differential equations", Scottish academic Press, (1973)
- [31] KRONIG R. de L. and PENNEY W.S., "Quantum Mechanics in crystal lattices", Proc. Ray. Soc, 130 (1931), 499-513.
- [32] RONVEAUX A., C.R. Ac. Sci. Paris, 270, pp. : 77-79 , (1970)
-

TABLE DES MATIERES

PRELIMINAIRES :	1.
INTRODUCTION :	
- Définition d'un état lié (spectre discret)	3.
- Spectre de bandes	4.
CHAPITRE I : L'équation de phase	
- Conditions aux limites non périodiques	6.
- Conditions aux limites périodiques	10.
- Remarque : élimination de solutions aux extrémités	13.
- Tableaux :	
1 Majoration (potentiel non périodique)	14.
2 Majoration (potentiel périodique)	15.
CHAPITRE II : Potentiel de Dirac	
- Calcul de la phase dans le cas d'un potentiel de Dirac.	
. Une seule distribution	16.
. Plusieurs distributions	18.
- Application à Schroedinger (potentiel δ non périodique)	
. Relation de récurrence	19.
. Une seule distribution	20.
. Plusieurs distributions	20.
. Détermination des E.T. donnant les états liés pour des distributions deltas déterminées	22.
- Détermination du spectre dans le cas de potentiel périodique	
. Une seule distribution périodique	22.
/ spectre pair	23.
/ spectre impair	24.

/ Comparaison de nos résultats et de ceux de Hund	25.
• Motif (2 distributions de même valeur) périodique	
/ Spectre pair	27.
/ Spectre impair	27.
- Tableau :	
1. Application numérique : détermination des états liés et de la bande pour des valeurs données	28.
CHAPITRE III : Caractérisation du 1^{er} et du $n^{è}$ état lié dans le cas d'un potentiel quelconque non périodique	
- Introduction	29.
- Tableaux :	
1. $E \neq 0$, potentiel asymétrique, CN et CS 1^{er} état lié	31.
2. $E \neq 0$, potentiel symétrique, CN et CS 1^{er} état lié	32.
3. $E = 0$, potentiel symétrique, CN et CS 1^{er} état lié	33.
4. $E = 0$, potentiel symétrique doublé, CN et CS 1^{er} état lié	34.
5. $E \neq 0$, potentiel asymétrique, CN et CS $N^{è}$ état lié	35.
6. $E \neq 0$, potentiel symétrique, CN et CS $n^{è}$ état lié	36.
7. $E = 0$, potentiel asymétrique, CN et CS $n^{è}$ état lié	37.
8. $E = 0$, potentiel symétrique, CN et CS $n^{è}$ état lié	38.
CHAPITRE IV : Caractérisation des bandes dans le cas d'un potentiel périodique	
- Introduction	39.
- Recherche de CN et CS à l'obtention de la $1^{ère}$ et $n^{è}$ bande	

. Rappel de la méthode employée pour caractériser la 1 ^{ère} bande	40.
. Développement de la méthode employée pour caractériser les n ^{ème} bande	
/ caractérisation des intervalles de stabilité pour $y''(x) - \lambda V(x)y(x) = 0$	40.
/ Caractérisation des intervalles de stabilité pour $y''(x) + (\lambda - V(x))y(x) = 0$	44.
. Tableaux :	
1. $E \neq 0$, potentiel symétrique périodique, CN et CS 1 ^{ère} bande	47.
2. $E = 0$, potentiel symétrique périodique, CN et CS 1 ^{ère} bande	48.
3. $E \neq 0$, potentiel périodique, CN et CS n ^{ème} bande	49.
4. $E = 0$, potentiel périodique, CN et CS n ^{ème} bande	50.
- Potentiel périodique versus équations différentielles à coefficients périodiques	
. propriétés des extrémités des bandes	51.
. tableau 5. apparition des bandes pour un potentiel carré	54.
- Applications : caractérisation de la 1 ^{ère} bande	
. équation de Mathieu	55.
. potentiel carré	
/ à énergie non nulle	56.
/ à énergie nulle	57.
ANNEXE I : L'équation de Hill et de Lyapunoff.	
- Equation de Hill	59.
- Equation de Lyapunoff	63.
ANNEXE II : Théorème de Borg et comparaison des résultats	65.

ANNEXE III : Bornes supérieures et inférieures au nombre de pôles d'une équation de Riccati	67.
CONCLUSIONS	71.
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	72.
TABLE DES MATIERES	76.
