

RECHERCHE COOPÉRATIVE SUR PROGRAMME N° 25

J. J. LOEFFEL

A. MARTIN

Propriétés analytiques des niveaux de l'oscillateur anharmonique et convergence des approximants de Pade

Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg - RCP25, 1970, tome 11
« Conférences de H. Epstein et V. Glaser, R. Gérard, J.J. Loeffel et A. Martin, P. Schapira », , exp. n° 3, p. 1-22

http://www.numdam.org/item?id=RCP25_1970__11__A3_0

© Université Louis Pasteur (Strasbourg), 1970, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la série « Recherche Coopérative sur Programme n° 25 » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

Ref. TH.1167-CERN

PROPRIETES ANALYTIQUES DES NIVEAUX DE L'OSCILLATEUR
ANHARMONIQUE ET CONVERGENCE DES APPROXIMANTS DE PADE

J.J. Loeffel et A. Martin
CERN - Geneva

Présentation : A. Martin

Conférence présentée à la réunion de mai 1970 de la
R.C.P. No.25 à Strasbourg.

Ref. TH.1167-CERN
25 mai 1970

1. - INTRODUCTION

L'an dernier vous avez déjà entendu le Professeur Wightman ¹⁾ vous parler du problème de l'oscillateur anharmonique, plus spécifiquement de l'étude des niveaux d'énergie du Hamiltonien

$$H = - \frac{d^2}{dx^2} + x^2 + \lambda x^4 \quad (1)$$

Il vous a décrit d'une part les résultats obtenus par Bender et Wu ²⁾ à l'aide de l'approximation W.K.B. mais sans justification de cette approximation, d'autre part les résultats rigoureux obtenus par Simon et Wightman ³⁾ en suivant les méthodes de Kato.

L'inconvénient des méthodes à la Kato est qu'elles permettent seulement d'aller jusqu'à un certain point mais non de découvrir la structure analytique complète des niveaux d'énergie en fonction de λ . L'avantage est que la méthode est aisément généralisable au cas de plusieurs dimensions.

Ici, renonçant provisoirement à l'espoir d'une généralisation à plusieurs dimensions, nous voulons tenter de résoudre le problème en exploitant au maximum le fait qu'il se réduit à l'étude des solutions d'une équation différentielle du second ordre (et non d'une équation aux dérivées partielles !) dans le domaine complexe.

Nous nous concentrerons tout d'abord sur l'Hamiltonien (1) et nous montrerons qu'il est possible de généraliser la caractérisation des niveaux et fonctions propres par le nombre de zéros de la fonction d'onde, valable dans le cas de λ réel positif, au cas de λ complexe, plus précisément $-\pi < \text{Arg } \lambda < +\pi$. Evidemment ces zéros deviendront complexes. Nous montrerons ainsi que chaque niveau $E(\lambda)$ est analytique dans un plan coupé $-\pi < \text{Arg } \lambda < +\pi$. Ceci combiné avec la positivité de $E(\lambda)$, à savoir $\text{Im}(E(\lambda))/\text{Im } \lambda > 0$ et certaines estimations sur les termes de la série asymptotique de $E(\lambda)$ autour de $\lambda = 0$ par

Simon ³⁾, conduit à la conclusion que $E(\lambda)$ est une fonction du type de Stieljes telle que la suite des approximants de Padé diagonaux (voir l'exposé de Froissart ⁴⁾) construits à l'aide de la série formelle de perturbation autour de $\lambda = 0$ converge vers $E(\lambda)$.

Tous ces résultats sont résumés dans une lettre de Simon, Wightman, Loeffel et moi-même ⁵⁾. Il est peut-être intéressant de noter que c'est ici même à Strasbourg que Loeffel et moi-même avons entendu parler pour la première fois de ce problème par Wightman. Ceci démontre clairement l'utilité de ces rencontres.

La dernière section de mon exposé sera une tentative de généralisation à des interactions polynomiales autres que $x^2 + \lambda x^4$. Je présenterai seulement quelques résultats partiels.

2. - GENERALITES, LE CHANGEMENT D'ECHELLE

Les états propres sont définis comme les solutions normalisables de

$$\left(- \frac{d^2}{dx^2} + x^2 + \lambda x^4 \right) \psi = E(\lambda) \psi \quad (2)$$

sur l'intervalle $-\infty + \infty$.

Au départ on s'intéresse uniquement à λ réel positif. Dans ce cas les résultats classiques s'appliquent et l'on peut montrer le caractère self-adjoint de l'Hamiltonien. Etant donné que l'interaction $x^2 + \lambda x^4$ est invariante dans $x \rightarrow -x$, on peut classer les états propres en états pairs et impairs, soit $\frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=0} = 0$, soit $\psi(x) \Big|_{x=0} = 0$.

Un inconvénient essentiel de (2) est que λ multiplie le terme dominant de l'interaction pour $|x| \rightarrow \infty$. Il en résulte que le terme λx^4 ne peut jamais être vraiment considéré comme une perturbation, aussi petit soit λ , bien que l'on puisse montrer que les termes successifs du développement formel des niveaux d'énergie en série de perturbation existent. C'est pourquoi, suivant Symanzik⁽⁶⁾, on effectue un changement d'échelle : on considère l'Hamiltonien

$$H' = - \frac{d^2}{dy^2} + \mu y^2 + y^4$$

et ses états propres

$$\left(- \frac{d^2}{dy^2} + \mu y^2 + y^4 \right) \psi'(y) = E' \psi'(y) \quad (3)$$

il est facile de voir que l'on passe de l'un à l'autre par le changement de variables

$$\begin{aligned} y &= x \lambda^{1/6} \\ \mu &= \lambda^{-2/3} \\ E'(\mu) &= \lambda^{-1/3} E(\lambda) \end{aligned} \quad (4)$$

Pour le moment nous travaillerons avec l'équation (3), d'un maniement beaucoup plus commode. Une étude préliminaire nécessaire est celle des solutions de (3) tendant vers zéro au voisinage de $y = \infty$. Cette étude a déjà été effectuée par Hsieh et Sibuya ⁷⁾ et nous allons ici nous contenter de résumer notre propre approche.

On recherche des solutions "approchées" de (3) de la forme $y^{-\alpha} \exp[-P(y)]$ où $P(x)$ est un polynôme. On choisit P et α de façon à faire disparaître de (3) les puissances de y les plus élevées. On trouve ainsi un candidat à une solution approchée

$$\phi(y) = y^{-1} \exp - \left[\frac{y^3}{3} + \frac{\mu y}{2} \right] \quad (5)$$

On construit alors une équation intégrale pour $\Psi'(y)/\phi(y)$ et l'on montre qu'il existe une solution de cette équation intégrale tendant vers 1 pour $y \rightarrow +\infty$. Ceci définit $\Psi'_{+\infty}(y, \mu, E')$. Notez que, pour le moment, E' n'est pas nécessairement une valeur propre. On démontre alors les résultats suivants

(i) $\Psi_{+\infty}'(y, \mu, E')$ est une fonction entière de y , μ et E .

(ii) le comportement

$$\Psi_{+\infty}'(y, \mu, E') \sim y^{-1} \exp - \left(\frac{y^3}{3} + \frac{\mu y}{2} \right)$$

est valable non seulement pour $y \rightarrow +\infty$ mais aussi pour

$$|y| \rightarrow \infty \quad |\text{Arg } y| < \frac{\pi}{6}. \quad (6)$$

Les énergies propres sont alors définies pour les conditions suivantes :

- pour les niveaux pairs, nous demandons

$$\left. \frac{d}{dx} \Psi_{+\infty}'(x, \mu, E') \right|_{x=0} = 0 \quad (7)$$

- pour les niveaux impairs, nous demandons

$$\Psi_{+\infty}'(x, \mu, E') \Big|_{x=0} = 0 \quad (8)$$

Dans les deux cas nous voyons que, d'après la propriété (6), les niveaux d'énergie sont donnés par les zéros d'une fonction entière de E' et de μ .

Il est possible de montrer qu'il suit de là qu'une solution E'_0 μ_0 de (7) [ou de (8)], où E'_0 et μ_0 sont finis, est entourée d'un voisinage dans lequel E' est une fonction analytique de μ avec un point de branchement d'ordre fini à $\mu = \mu_0$. Cependant il est difficile d'étudier à partir de (7) où (8) la structure globale des énergies propres en fonction de μ . Nous résoudrons ces problèmes à la Section 4 par des méthodes particulières.

3. - RESTRICTIONS DUES A LA POSITIVITE. INEGALITES VARIATIONNELLES

Ici nous voulons établir quelques inégalités sur les énergies propres $E(\lambda)$ et $E'(\mu)$ valables pour tous les niveaux.

A) La positivité

Nous savons définir des $\psi'(y, \mu, E')$ pour tout μ et donc par le changement d'échelle (4), des ψ , pour $|\text{Arg } \lambda| < \pi$. Soit un état propre ψ , E , nous avons

$$\int \psi^* H \psi dx = E \int \psi^* \psi dx$$

donc prenant la partie imaginaire des deux membres

$$\frac{\text{Im } E(\lambda)}{\text{Im } \lambda} = \frac{\int |\psi|^2 x^4 dx}{\int |\psi|^2 dx} > 0 \quad (9)$$

de même si l'on travaille avec les ψ' on trouve

$$\frac{\text{Im } E'(\mu)}{\text{Im } \mu} = \frac{\int |\psi'|^2 y^2 dy}{\int |\psi'|^2 dy} > 0 \quad (10)$$

(9) et (10) sont des restrictions très importantes. Elles montrent que $E(\lambda)$ ou $E'(\mu)$ ne peuvent pas avoir de singularités isolées en dehors de l'axe réel : dans le voisinage d'une singularité isolée (pôle, singularité essentielle isolée) la partie imaginaire de E ou de E' ne peut pas garder un signe constant.

B) Inégalités variationnelles

Par la technique d'intégration déjà décrite, nous avons

$$\int \left(\left| \frac{d\psi'}{dy} \right|^2 + \mu |\psi'|^2 y^2 + y^4 |\psi'|^2 \right) dy = E'(\mu) \int |\psi'|^2 dy \quad (11)$$

Combinant les parties réelles et imaginaires de cette équation, nous obtenons

$$\begin{aligned} & \operatorname{Re} E'(\mu) + \gamma \operatorname{Im} E'(\mu) \\ &= \frac{\int \left[\left| \frac{d\psi'}{dy} \right|^2 + y^4 |\psi'|^2 + (\operatorname{Re} \mu + \gamma \operatorname{Im} \mu) y^2 |\psi'|^2 \right] dy}{\int |\psi'|^2 dy} \quad (12) \end{aligned}$$

Le membre de droite peut être considéré comme une approximation variationnelle de l'énergie de l'état fondamental du Hamiltonien

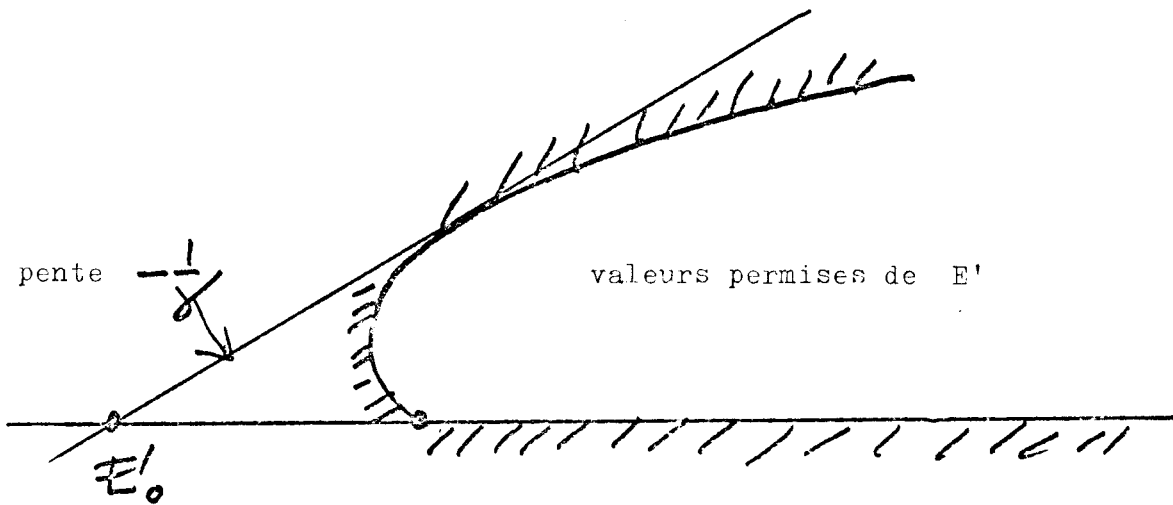
$$H' = - \frac{d^2}{dy^2} + (\operatorname{Re} \mu + \gamma \operatorname{Im} \mu) y^2 + y^4$$

avec la fonction d'onde d'essai ψ' . Nous avons donc

$$\operatorname{Re} E'(\mu) + \gamma \operatorname{Im} E'(\mu) \geq E'_0(\operatorname{Re} \mu + \gamma \operatorname{Im} \mu) \quad (13)$$

pour $-\infty < \gamma < +\infty$, où E'_0 représente l'état fondamental correspondant au couplage $\text{Re } \mu + \gamma \text{Im } \mu$.

Chaque inégalité (13) définit un demi-plan de valeurs permises de E' . L'intersection de cette famille de demi-plans est un domaine convexe ne contenant comme seule direction possible à l'infini que la direction $E' \rightarrow +\infty$.



Ceci permet d'établir que, comme dans le cas self-adjoint (μ réel), le seul point d'accumulation possible des valeurs propres est $E' = +\infty$ [si l'on tient compte du fait qu'à partir de (7) et (8) il ne peut y avoir de point d'accumulation à distance finie].

A l'aide d'estimations de E'_0 pour les valeurs réelles de μ , qui sont faciles à obtenir ($E'_0 \gtrsim -\mu^2/4$ pour $\mu^{\text{réel}} \rightarrow +\infty$) on peut calculer plus précisément le domaine permis et l'on trouve que la courbe limite supérieure est une parabole.

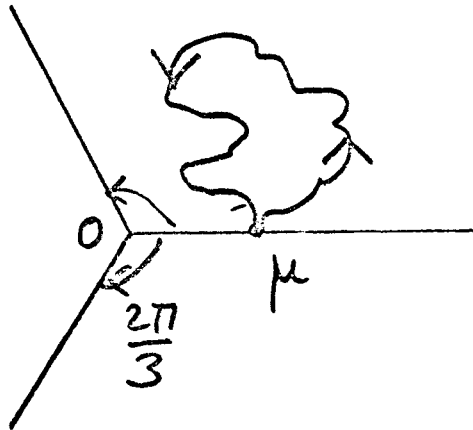
Notons que toutes les considérations de cette Section s'étendent au cas d'interactions polynômiales plus complexes pourvu que le terme dominant de H' soit x^{2N} et s'étendent aussi au cas de plusieurs dimensions.

4. - CARACTERISATION DES ETATS PROPRES PAR LES ZEROS

Jusqu'ici nous ne savons pas encore grand chose sur les singularités de $E'(\mu)$. Nous savons seulement que $E'(\mu)$ est donné comme fonction implicite de μ par les zéros d'une fonction entière de E' et de μ et que les E' sont soumis aux inégalités (10) et (13). En particulier nous voulons savoir où sont situés les points de branchement de $E'(\mu)$ et s'il existe des frontières naturelles de certaines branches.

Les considérations générales de la Section précédente ne permettent pas de trancher ces questions car elles traitent sur le même pied la suite infinie des énergies propres pour un μ donné. Or nous voulons nous intéresser à une valeur propre particulière. Il faut donc pouvoir identifier cette valeur propre et cette fonction propre pour μ complexe. La théorie classique des équations différentielles du second ordre nous apprend que, pour μ réel (cas self-adjoint), nous pouvons classer les fonctions propres par le nombre de leurs zéros sur l'axe réel. L'énergie propre la plus basse correspond à une fonction d'onde sans zéro, le niveau suivant un seul zéro, etc. Le $n^{\text{ième}}$ niveau $E'_n(\mu)$ est associé à une fonction d'onde ayant n zéros sur l'axe réel. D'autre part, Simon ³⁾ a montré que ces niveaux sont continuable en μ dans le voisinage de l'axe réel à l'aide des méthodes de Kato.

Nous voulons montrer que pour $|\text{Arg } \mu| < \frac{2\pi}{3}$ il est possible de continuer à caractériser les niveaux par le nombre de zéros dans une certaine région complexe (évidemment il ne faut pas s'attendre à ce que les zéros restent réels). Nous montrerons que si $|\text{Arg } \mu| < \frac{2\pi}{3}$ le nombre de zéros d'une fonction d'onde $\psi'_n(z, \mu)$ associée à une continuation du niveau $E'_n(\mu)$ dans $|\text{Arg } z| < \frac{\pi}{6}$ est constant. Si donc nous partons d'une valeur réelle de μ et effectuons une continuation de $E'_n(\mu)$ le long d'un chemin contenu dans $|\text{Arg } \mu| < \frac{2\pi}{3}$ retournant à la valeur initiale de μ , nous retrouvons le même nombre de zéros dans $|\text{Arg } z| < \frac{\pi}{6}$ et en fait sur l'axe réel positif. La fonction d'onde est donc exactement identique à celle dont on est parti. Comme ceci est vrai



pour tous les chemins contenus dans $|\arg \mu| < \frac{2\pi}{3}$ cela signifie que $E'_n(\mu)$ n'a aucun point de branchement dans cette région.

Pour que ce raisonnement soit valable il faut évidemment que la continuation soit possible et que les éventuels points de branchement soient isolés. Si l'on peut montrer que lors de la continuation $E'_n(\mu)$ reste borné, alors les points de branchement sont nécessairement isolés et l'on ne rencontre pas de frontière naturelle, en vertu de (7) ou (8) (suivant la parité).

Commençons par montrer qu'aussi loin qu'on puisse continuer analytiquement $E'_n(\mu)$ pour $|\text{Arg } \mu| < \frac{2\pi}{3}$ le nombre de zéros de ψ' dans $|\text{Arg } z| < \frac{\pi}{6}$ est fixe.

Considérons tout d'abord le cas de μ réel. Nous étudions l'équation de Schrödinger le long d'un rayon

$$z = r e^{i\phi} \quad 0 \leq \phi < \frac{\pi}{6}$$

Elle devient

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \mu r^2 e^{4i\phi} + r^4 e^{6i\phi} - E' e^{2i\phi} \right) \psi' = 0 \quad (14)$$

Notons que d'après la condition (10) $\text{Im } E' = 0$ si $\text{Im } \mu = 0$. On multiplie par ψ^* et on intègre de 0 à r : il vient

$$\int_0^r \psi'^* \frac{d\psi'}{dr} = \int_0^r \left[\left| \frac{d\psi'}{dr} \right|^2 + (\mu r'^2 e^{4i\phi} + r'^4 e^{6i\phi} - E' e^{2i\phi}) |\psi'|^2 \right] dr'$$

[Notez que soit $\psi'(r=0) = 0$, soit $\frac{d\psi'}{dr}(r=0) = 0$], et donc pour μ réel, E' réel

$$\text{Im} \left(\psi'^* \frac{d\psi'}{dr} \right) = \int_0^r (\mu r'^2 \sin 4\phi + r'^4 \sin 6\phi - E' \sin 2\phi) |\psi'|^2 dr' \quad (15)$$

de même, puisque $|\phi| < \frac{\pi}{6}$ $\psi' \rightarrow 0$, pour $r \rightarrow \infty$ et donc on peut aussi intégrer de r à ∞ :

$$-\text{Im} \left(\psi'^* \frac{d\psi'}{dr} \right) = \int_r^\infty (\mu r'^2 \sin 4\phi + r'^4 \sin 6\phi - E' \sin 2\phi) |\psi'|^2 dr' \quad (16)$$

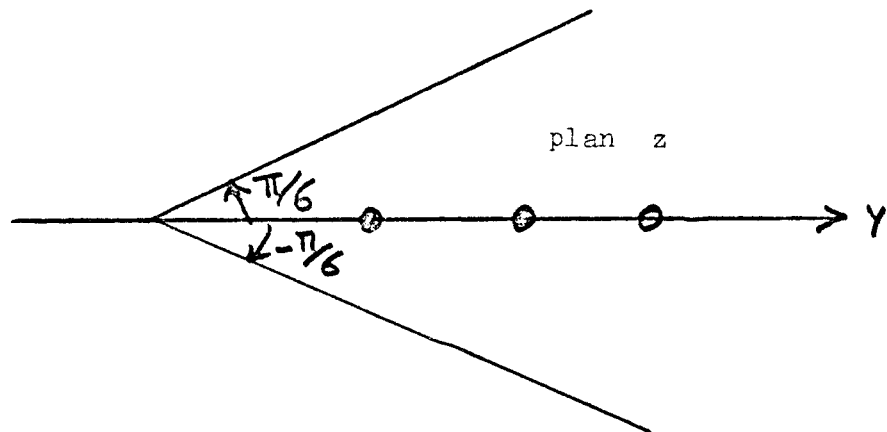
Nous notons que dans (15) ou (16) l'intégrant est une forme quadratique en r'^2 qui peut s'annuler 0, 1 ou 2 fois lorsque r'^2 varie de 0 à l'infini. Avec $0 < \phi < \frac{\pi}{6}$ la quantité

$$\mu r'^2 \sin 4\phi + r'^4 \sin 6\phi - E' \sin 2\phi$$

est certainement positive pour $r'^2 \rightarrow \infty$. Il suffit donc d'avoir $E' > 0$ pour être sûr qu'elle est négative à $r'^2 = 0$. Alors cette quantité s'annule une fois et une seule pour $r' = r_0$. Dans ces conditions, on utilise (15) pour $r < r_0$ et (16) pour $r > r_0$ pour montrer que $\text{Im}(\psi' * \frac{d\psi'}{dr}) \neq 0$. En conclusion, si $E'(\mu) > 0$ (μ réel) les seuls zéros de $\psi'(z)$ dans $|\text{Arg } z| < \frac{\pi}{6}$ sont sur l'axe réel positif. Une condition suffisante (mais non nécessaire) pour avoir $E'(\mu) > 0$ est $\mu > 0$ car alors H' est défini positif. Ces zéros d'après la théorie classique des équations différentielles sont caractéristiques des niveaux successifs.

D'autre part, notons que, pour $y^4 + \mu y^2 > E'$, c'est-à-dire y réel suffisamment grand, on a $\frac{d^2\psi'}{dy^2} / \psi' < 0$ et, puisque $\psi' \rightarrow 0$ à $y \rightarrow \infty$, ψ' n'a pas de zéro.

La situation, pour μ réel > 0 est donc la suivante



Considérons maintenant le cas de μ complexe. A nouveau nous partons de l'équation (14) le long d'un rayon $z = r e^{i\phi}$ $-\frac{\pi}{6} < \phi < +\frac{\pi}{6}$. Les analogues de (15) et (16) sont

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \left(\psi'^* \frac{d\psi}{dr} \right) &= \\ \int_0^{r'} \left[r'^4 \sin 6\phi + r'^2 |\mu| \sin(4\phi + \operatorname{Arg} \mu) - |E'| \sin(2\phi + \operatorname{Arg} E') \right] dr' & \quad (17) \\ &= - \int_{r'}^{\infty} \left[\dots \right] dr' \end{aligned}$$

Supposons que

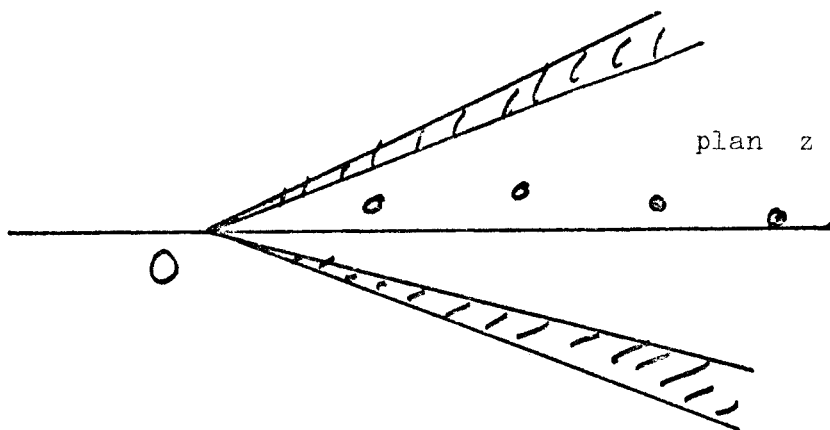
$$|\operatorname{Arg} E'| < \frac{\pi}{3} - 2\varepsilon \quad (18)$$

alors, clairement

$$\begin{aligned} \sin(2\phi + \operatorname{Arg} E') > 0 & \quad \text{pour} \quad \frac{\pi}{6} - \varepsilon < \phi < \frac{\pi}{6} \\ \sin(2\phi + \operatorname{Arg} E') < 0 & \quad \text{pour} \quad -\frac{\pi}{6} < \phi < -\frac{\pi}{6} + \varepsilon \end{aligned} \quad (19)$$

Par conséquent, le crochet dans (17) est alors de signes opposés pour $r' = 0$ et $r' = \infty$ et ψ' ne s'annule pas. La condition (18) peut être remplacée par une autre : d'après les équations (4) nous avons $E'(\mu) = \mu^{\frac{1}{2}} E(\lambda = \mu^{-2/3})$; si $0 < \operatorname{Arg} \mu < \frac{2\pi}{3}$, nous aurons tout d'abord, d'après la condition de positivité (10) $0 < \operatorname{Arg} E' < \pi$. D'autre part, d'après la condition de positivité (9) $-\pi < \operatorname{Arg} E(\mu^{-2/3}) < 0$

et donc $0 < \text{Arg } E' < \frac{\text{Arg } \mu}{2} < \frac{\pi}{3}$. On étudie de la même façon le cas $-\frac{2\pi}{3} < \text{Arg } \mu < 0$. En bref, $|\text{Arg } \mu| < \frac{2\pi}{3}$ entraîne $|\text{Arg } E'| < \frac{\pi}{3}$, et, par conséquent, on a alors deux intervalles angulaires $\frac{\pi}{6} - \varepsilon < \vartheta < \frac{\pi}{6}$, $-\frac{\pi}{6} < \vartheta < -\frac{\pi}{6} + \varepsilon$ dans lesquels ψ' n'a pas de zéros :



Notons aussi qu'en raison de la forme asymptotique de ψ'

$$\psi' \sim \frac{1}{z} \exp - \left(\frac{z^3}{3} + \frac{\mu z}{2} \right)$$

il n'y a pas non plus de zéros pour z grand dans $|\text{Arg } z| < \frac{\pi}{6} - \varepsilon$.

Si une continuation analytique est possible d'une valeur réelle de μ à une valeur complexe de μ dans $|\text{Arg } \mu| < \frac{2\pi}{3}$ la fonction d'onde varie d'une manière continue et les zéros ne peuvent pas apparaître ou disparaître à l'intérieur de la région $|\text{Arg } z| < \frac{\pi}{6}$. Mais ils ne peuvent pas non plus en franchir la frontière comme nous venons de le démontrer. Leur nombre reste donc constant et égal à celui de la fonction d'onde dont on est parti sur l'axe réel positif.

Il est clair que si nous effectuons un circuit fermé en partant de l'axe réel et retournant à l'axe réel nous retrouverons une fonction d'onde avec le même nombre de noeuds que celle dont nous sommes partis et, par conséquent, le même niveau d'énergie.

La seule question qui reste est celle de savoir s'il y a un obstacle à une continuation analytique. Celle-ci est toujours possible, avec des points de branchements isolés éventuels, aussi longtemps que E' reste borné. Nous allons aussi démontrer ce dernier point en utilisant les zéros.

Un état propre - disons pair - est tel que $\frac{d\Psi'}{dz}(z=0, \mu) = 0$. On peut intégrer l'équation de Schrödinger depuis l'origine et l'écrire sous la forme de Volterra :

$$\Psi' = \cos(\sqrt{E'}z) + \frac{1}{k} \int_0^z \sin(\sqrt{E'}(z-z')) (z'^4 + \mu z'^2) \Psi'(z') dz' \quad (20)$$

sur cette équation il n'est pas difficile de montrer que, pour $|z| < R$ R arbitraire, on a $[\Psi' - \cos(\sqrt{E'}z)] / [\exp|\operatorname{Im}(\sqrt{E'}z)|] \rightarrow 0$ pour $E' \rightarrow \infty$. On parvient ainsi à montrer, à l'aide du théorème de Rouché que dans un secteur formé de

$$\operatorname{Arg} z = - \frac{\operatorname{Arg} E'}{2} + \varepsilon$$

$$\operatorname{Arg} z = - \frac{\operatorname{Arg} E'}{2} - \varepsilon$$

$$|z| = \pi \left[\frac{R}{\pi} \right]$$

où $[]$ désigne la partie entière, le nombre de zéros de Ψ' est égal à $\left[\frac{R}{\pi} \right]$ pour E' assez grand. Comme ce secteur est entièrement contenu dans $|\operatorname{Arg} z| < \frac{\pi}{6}$, puisque d'après les résultats de la Section 3, E' ne peut tendre vers l'infini qu'avec $\operatorname{Arg} E' \rightarrow 0$, nous aboutissons à une contradiction, à savoir un trop grand nombre de zéros si $|E'|$ est trop grand. E' reste donc borné au cours de la continuation et rien n'arrêtera cette continuation.

En conclusion $E'_n(\mu)$ est analytique dans $|\text{Arg } \mu| < \frac{2\pi}{3}$ et d'après (4), $E_n(\lambda)$ est analytique dans $|\text{Arg } \lambda| < \pi$, c'est-à-dire dans un plan coupé.

Si nous complétons ce résultat par la condition de positivité (9) $\text{Im } E(\lambda) / \text{Im } \lambda > 0$, nous voyons que la fonction $E(\lambda)$ est une fonction de Herglotz réelle pour $\lambda > 0$. En outre, Simon ³⁾ a montré que les coefficients du développement asymptotique $E = \sum c_n \lambda^n$ satisfaisaient la condition de Carleman $\sum |c_n|^{-1/2n+1}$ divergente.

Dans ces conditions, on peut montrer la convergence de la suite des approximants de Padé diagonaux vers E . Ces approximants s'écrivent $P_N(\lambda)/Q_N(\lambda)$ où P_N et Q_N sont des polynômes de degré N tels que formellement

$$\sum c_n \lambda^n - \frac{P_N}{Q_N} = O(\lambda^{2N+1})$$

5. - GENERALISATION A D'AUTRES INTERACTIONS

Partant directement de la forme réduite on peut s'intéresser aux cas

$$\left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^{2n} + \sum \mu_p y^{2n-p} - E' \right) \psi' = 0$$

Toutes les considérations sur la forme asymptotique des solutions s'étendent sans difficulté. Toute la Section 2 peut être reproduite avec les modifications suivantes

- a) $\psi'_{+\infty} \rightarrow 0$ pour $|\text{Arg } z| < \pi/2(n+1)$;
- b) si l'interaction n'est pas paire il faut aussi définir $\psi'_{-\infty}$. Les états propres sont alors donnés par le Wronskien $W(\psi'_{+\infty}, \psi'_{-\infty}) = 0$. C'est encore une fonction entière des μ_p et de E' .

Les inégalités variationnelles persistent :

$$\text{Re}(E'(\mu_1, \dots, \mu_{2n}) + \gamma \Im E'(\mu_1, \dots, \mu_{2n})) > E'_0(\text{Re } \mu_1 + \gamma \Im \mu_1, \dots, \text{Re } \mu_{2n} + \gamma \Im \mu_{2n})$$

l'on prouve ainsi que les valeurs permises de E' sont dans un domaine convexe s'étendant à l'infini seulement dans la direction $\text{Arg } E' = 0$.

Il est beaucoup plus difficile d'énoncer un résultat général sur le nombre de zéros. En premier lieu, il est beaucoup plus simple de se limiter aux interactions paires de façon à pouvoir faire usage de $\psi'(z=0) = 0$ ou de $(d\psi'/dr)(r=0) = 0$ et d'intégrer le long de rayons $\text{Arg } z = \text{const}$. Dans ce cas l'on trouve des résultats analogues à celui de l'oscillateur anharmonique en $\mu x^2 + x^4$. Je voudrais simplement insister sur un point : nous savons d'après Kato que chaque niveau

d'énergie $E_m(\mu_1, \dots, \mu_{2n})$ est développable dans une boule $|\mu_1|^2 + \dots + |\mu_{2n}|^2 < R_m$ en perturbations. Ce que l'on peut montrer au moins dans le cas des interactions paires ($\mu_1 = \mu_3, \dots = 0$) c'est que le rayon de cette boule tend vers l'infini avec m (où m est le nombre de noeuds de la fonction d'onde non perturbée). Le principe est fort simple :

On intègre le long d'un rayon

$$\text{Arg } z = \phi, \quad \frac{\pi}{2(n+1)} - \varepsilon < \phi < \frac{\pi}{2(n+1)}$$

et l'on suppose

$$|\mu_2|^2 + |\mu_4|^2 + \dots + |\mu_{2n}|^2 < R$$

R arbitraire. Alors

$$\begin{aligned} & \text{Im} \left(\psi'^* \frac{d\psi'}{dr} \right) \\ &= \int_0^r \sigma_r \int_r^\infty \left[r'^{2n} \sin[(2n+1)\phi] - |E'| \sin(2\phi + \text{Arg } E') \right] + P_{2n-2}(r') \, dr' \end{aligned}$$

où $P_{2n-2}(r')$ est un polynôme de degré $2n-2$ à coefficients dépendant des μ_p .

Si $|E'|$ est très grand, $|\text{Arg } E'|$ est aussi voisin que l'on veut de 0. On peut prendre $|E'| > E'_0$ tel que pour ϕ voisin de $\pm(\pi/2(n+1))$ $\sin(2\phi + \text{Arg } E')$ ait le signe de $\sin 2\phi$. Il est facile de voir qu'étant donné ϕ et R il est possible de choisir $E' > E'_0$, de façon que le crochet s'annule au plus une fois pour $0 < r' < \infty$.

On montre ainsi que le nombre de zéros, dans l'angle $|\text{Arg } z| < (\pi/2(n+1))$ reste fixe si $|E'|$ est assez grand. Il n'y a donc pas de point de branchement. Pour être assuré d'avoir $|E'|$ assez grand il faut choisir $E'_m(\mu_p=0)$ assez grand et s'assurer que $|E'|$ ne diminue pas trop lorsque les μ_p varient dans la boule $\sum |\mu_p|^2 = R$. De cela il est aussi possible de s'assurer en calculant une borne supérieure du nombre de zéros dans l'angle en fonction de E' , à partir de

la forme de Volterra analogue à (20). Si partant d'un $E_m'(\mu_p=0)$ très grand E_m' diminue trop le nombre de zéros devrait diminuer déjà avant $|E_m'| = E_1'$, ce qui est impossible.

Plus R sera choisi grand, plus E_0' et E_1' seront grands et plus m nombre de zéros de la fonction d'onde non perturbée devra être grand, mais le procédé marchera toujours, aussi grand soit R .

Le domaine de convergence de la série des perturbations de $E_m(\mu_2, \dots, \mu_{2n})$ tend donc vers l'infini avec m .

6. - REMARQUES FINALES

On peut se demander ce qui motive l'étude de l'oscillateur anharmonique. On peut dire ceci : si nous regardons $E(\lambda)$ nous avons un exemple où les termes successifs de la série des perturbations existent sans que la série converge. C'est une situation analogue à celle (probable) de la théorie des champs, par exemple l'interaction en $\lambda \phi^4$.

Or ici, par l'étude de l'analyticité en λ nous arrivons à prouver qu'il existe un procédé de construction de suites construites à partir des termes perturbatifs qui converge vers la réponse exacte. C'est un encouragement pour le cas de la théorie des champs où certains physiciens utilisent ces procédés de sommation sans savoir s'ils convergent. Mais il y a un grand pas à faire avant de passer d'une dimension (notre cas) à une infinité de dimensions (le cas de la théorie des champs) et malheureusement nos méthodes sont difficiles à généraliser, ne serait-ce qu'à deux dimensions ! On peut, plus modestement, dire que nos résultats peuvent être utiles, tels quels, dans des problèmes de spectroscopie moléculaire par exemple. Dans cet esprit, la convergence des approximants de Padé avait déjà été testée empiriquement par Reid ⁸⁾, à l'aide d'une calculatrice électronique !

REFERENCES

- 1) A.S. Wightman - R.C.P. No 25, Strasbourg (Mai 1969).
- 2) C. Bender et T.T. Wu - Phys.Rev.Letters 21, 406 (1968).
C. Bender et T.T. Wu - Phys.Rev. 184, 1231 (1969) ;
C. Bender - J.Math.Phys. 11, 797 (1970).
- 3) B. Simon - Princeton Preprint (Septembre 1969) ; soumis à
Ann.Phys.
- 4) M. Froissart - R.C.P. No 25, Strasbourg (Novembre 1969).
- 5) J.J. Loeffel, A. Martin, B. Simon et A.S. Wightman - Phys.Letters
30B, 656 (1969).
- 6) K. Symanzik - Communication privée à A.S. Wightman.
- 7) P.S. Hsieh et Y. Sibuya - J.Math.Analysis and Applications
16, 84 (1966).
- 8) C. Reid - J.Quantum Chemistry 1, 521 (1967).