ANNALES SCIENTIFIQUES DE L'É.N.S.

YVES COLIN DE VERDIÈRE

Une formule de traces pour l'opérateur de Schrödinger dans $\mathbb{R}^3$

Annales scientifiques de l'É.N.S. 4e série, tome 14, nº 1 (1981), p. 27-39

<http://www.numdam.org/item?id=ASENS_1981_4_14_1_27_0>

Ann. scient. Éc. Norm. Sup.
4e série, t. 14, 1981, p. 27 à 39.

UNE FORMULE DE TRACES POUR L'OPÉRATEUR DE SCHRÖDINGER DANS $\mathbb{R}^3$

PAR YVES COLIN DE VERDIÈRE

Soit $H_0 = -\Delta_0$ et $H = H_0 + V$ l'opérateur de Schrödinger dans $\mathbb{R}^3$ où V est un potentiel supposé C^∞ à support compact; nous mettons en évidence une formule de traces reliant $Z(t) = \mathrm{Tr}(e^{-tH} - e^{-tH_0})$ $(t > 0)$, les valeurs propres (négatives et en nombre fini) de H et le déterminant de la matrice de scattering $S(k)$ $(k \geqq 0)$. Des formules de ce type ont déjà été établies dans un contexte différent ([B-K], [L-P 2]); il y a aussi une certaine parenté avec la formule des traces de Selberg dans le cas non compact [L-P 1]. La démonstration de cette formule (§ 2) utilise une relation entre un déterminant de Fredholm $D(k)$ associé à l'équation de Lippmann-Schwinger, et dét $(S(k))$, établie par R. G. Newton [N].

Dans la suite, nous prouvons l'existence d'un développement asymptotique pour dét $S(k)$, $k \to +\infty$ en utilisant une formule de représentation intégrale pour $D(k)$.

Nous établissons alors l'existence du développement asymptotique

$$Z(t) \sim (4\pi t)^{-3/2} \left(\sum_{j=1}^{\infty} a_j t^j \right),$$

où les a_j sont des intégrales sur $\mathbb{R}^3$ de polynômes universels en V et ses dérivées, analogues aux intégrales premières de l'équation de Korteweg-de Vries en dimension 1 [F-Z]. Nous calculons les a_j pour $1 \leqq j \leqq 4$.

Il est alors facile d'utiliser la formule de trace pour calculer le développement asymptotique de dét $S(k)$ à l'aide des a_j. Pour terminer, nous étudions une conjecture naturelle qui généraliserait certaines inégalités sur les sommes de puissances de valeurs propres obtenues en dimension 1 (*voir* par exemple [F-Z]). Il faut noter également que, dans le cas du scattering avec un obstacle, Majda et Ralston ont obtenu des renseignements du même type sur le comportement asymptotique du déterminant de $S(k)$ dans $k \to +\infty$ [M-R].

1. L'équation de Lippmann-Schwinger

Soit $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$, $H_0 = -\Delta$ et $H = H_0 + V$. Il est tout à fait élémentaire de prouver que H est essentiellement auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ de domaine l'espace de Sobolev $H^2(\mathbb{R}^3)$. Le spectre de H se compose d'un nombre fini de valeurs propres :

$$E_1 < E_2 \leqq E_3 \ldots \leqq E_N < E_{N+1} = \ldots = E_{N'} = 0,$$

répétées un nombre de fois égal à leur multiplicité et d'un spectre absolument continu $[0, +\infty[$ de multiplicité infinie. L'étude de la théorie spectrale de H se fait à l'aide de la matrice de scattering dont nous rappelons maintenant brièvement la définition (*voir* [R-S], [S 1], [S 2]).

On introduit ([S1], chap. IV) les opérateurs de Møller :

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \to \mp\infty} e^{itH} \circ e^{-itH_0} \quad \text{(limite forte)},$$

puis l'opérateur $S = (\Omega_-)^* \Omega_+$. On prouve alors que $\operatorname{Im} \Omega_+ = \operatorname{Im} \Omega_- = P_{ac}(L^2(\mathbb{R}^3))$ où P_{ac} est le projecteur sur la partie absolument continue du spectre de H; on en déduit que S est unitaire et commute avec Δ. Utilisant la représentation spectrale de Δ obtenue par la transformée de Fourier :

$$\Lambda : \quad L^2(\mathbb{R}^3) \to L^2(\mathbb{R}^+, L^2(S^2)),$$

définie par :

$$\hat{f}(k)(\omega) = \frac{k}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-ik\langle\omega|x\rangle} f(x)\, dx,$$

on peut écrire ([S 1], chap. V) S sous la forme $\widehat{S f(k)} = S(k) \hat{f}(k)$ où $S(k)$ est, pour $k \geqq 0$, un opérateur unitaire sur $L^2(S^2)$. De plus $S(k)$ est de la forme $S(k) = \mathrm{Id} + R(k)$ où $R(k)$ est un opérateur à noyau C^∞, on peut calculer ce noyau en résolvant l'équation de Lippmann-Schwinger par le procédé que nous allons décrire ([S 2], p. 96-109).

On désigne par $G(k)(k \in \Omega)$, l'opérateur linéaire sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ dont le noyau est :

$$G(k; x, y) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik\|x-y\|}}{\|x-y\|};$$

pour $\operatorname{Im} k > 0$, on a $G(k) = (k^2 - H_0)^{-1}$. On désigne par $K(k)(k \in \mathbb{C})$ l'opérateur $K(k) = |V|^{1/2} G(k) V^{1/2}$ où $V^{1/2} = \operatorname{sgn}(V) |V|^{1/2}$. L'opérateur $K(k)$ est de Hilbert-Schmidt. On montre que pour $k > 0$, $\mathrm{Id} - K(k)$ est inversible et donc que l'équation :

$$\psi(x; k, \omega) = |V|^{1/2}(x) e^{ik\langle x|\omega\rangle} + K(k) \psi(x; k, \omega), \tag{1.1}$$

admet une solution unique ; on pose alors :

$$\varphi(x; k, \omega) = e^{ik\langle x|\omega\rangle} + G(k) V^{1/2} \psi(x; k, \omega);$$

les fonctions $\varphi(x;\, k,\, \omega)$ sont des fonctions propres généralisées de H : on a, au sens des distributions $(\mathrm{H}-k^2)\,\varphi(x;\, k,\, \omega)=0$. On montre alors que :

$$\mathrm{R}(k;\, \omega,\, \omega')=\frac{-ik}{8\pi^2}\int_{\mathbb{R}^3} e^{-ik\langle x\mid\omega'\rangle}\,\mathrm{V}(x)\,\varphi(x;\, k,\, \omega)\,dx. \tag{1.2}$$

On introduit alors, avec R. Newton [N], $\mathrm{D}(k)=\mathrm{d\acute{e}t}_2(1-\mathrm{K}(k))$ ([S 2], p. 106 pour la définition de $\mathrm{d\acute{e}t}_2$). Cette fonction entière qui joue un rôle important dans la suite, a les propriétés suivantes [N] :

$$\lim_{|k|\to\infty,\ \mathrm{Im}\, k\geqq 0} \mathrm{D}(k)=1. \tag{1.3}$$

(1.4) Les zéros de $\mathrm{D}(k)$ dans $\mathrm{Im}\, k\geqq 0$ sont $i\sqrt{-\mathrm{E}_1},\ \ldots,\ i\sqrt{-\mathrm{E}_\mathrm{N}}$ avec un ordre égal à la multiplicité des valeurs propres correspondantes et éventuellement 0 avec un ordre $2m+\varepsilon$, où m est la multiplicité de la valeur propre 0 et $\varepsilon=0$ ou 1.

(1.5) Pour $\mathrm{Im}\, k>0$.

$$\frac{d}{dk}\,\mathrm{Log}\ \mathrm{D}(k)=2k\ \mathrm{Tr}\,((k^2-\mathrm{H})^{-1}(\mathrm{G}(k)\,\mathrm{V})^2).$$

(1.6) Pour $k>0$, on a :

$$\mathrm{d\acute{e}t}\ \mathrm{S}(k)=\exp\left(-\frac{ik}{2\pi}\int\mathrm{V}\right)\mathrm{D}(-k)/\mathrm{D}(k)\quad (\textit{voir}\ \text{aussi [B-K]}).$$

Remarque. — Parmi ces propriétés, seules (1.4) et (1.6) ne sont pas élémentaires. La difficulté dans (1.4) étant de préciser l'ordre d'annulation de $\mathrm{D}(k)$ en 0 et de prouver que $\mathrm{D}(k)$ ne s'annule pas sur $\mathbb{R}\setminus\{0\}$, ce qui résulte du fait que H n'a pas de valeurs propres strictement positives et que l'ensemble singulier $\mathscr{E}$ introduit dans [R-S] (p. 101 et suivantes) est réduit à 0 (*voir* aussi [A-S] pour une preuve de ce résultat). La relation (1.6) est une conséquence de l'écriture (1.2) pour le noyau de $\mathrm{S}(k)$-Id.

2. Une formule de traces

On va prouver la formule suivante x, pour $t>0$:

$$\mathrm{Z}(t)=\mathrm{Tr}\,(e^{-t\mathrm{H}}-e^{-t\mathrm{H}_0})=\sum_{l=1}^{\mathrm{N}'} e^{-t\mathrm{E}_l}+\frac{\varepsilon}{2}+\frac{1}{2i\pi}\int_0^{+\infty} e^{-tk^2}\,\frac{d}{dk}\,\mathrm{Log}\ \mathrm{d\acute{e}t}\ \mathrm{S}(k).dk. \tag{2.1}$$

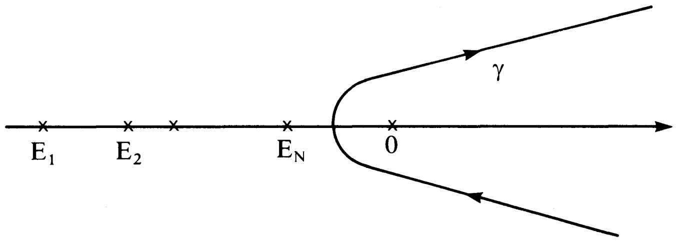
Soit :

$$\mathrm{Z}_1(t)=\mathrm{Z}(t)-\sum_{l=1}^{\mathrm{N}} e^{-t\mathrm{E}_l},$$

on a :

$$Z_1(t)=\frac{-1}{2i\pi}\int_\gamma e^{-tz}\,\mathrm{Tr}((z-\mathrm{H})^{-1}-(z-\mathrm{H}_0)^{-1})\,dz,$$

où γ est le chemin représenté ci-dessous :



Remarquons en effet que cette intégrale converge absolument, ce qui prouvera en même temps l'existence de $\mathrm{Tr}(e^{-t\mathrm{H}}-e^{-t\mathrm{H}_0})$: soit $\mathrm{A}(z)=(z-\mathrm{H})^{-1}-(z-\mathrm{H}_0)^{-1}$ et posons $\mathbb{R}_0(z)=(z-\mathrm{H}_0)^{-1}$, on a alors :

$$\mathrm{A}(z)=(\mathrm{Id}-\mathscr{R}_0(z)\mathrm{V})^{-1}\mathscr{R}_0(z)\mathrm{V}\mathscr{R}_0(z),$$

et donc; d'après [S 2], p. 31 :

$$\|\mathrm{A}(z)\|_1\leqq\|(\mathrm{Id}-\mathscr{R}_0(z)\mathrm{V})^{-1}\|_\infty\|\mathscr{R}_0(z)\mathrm{V}^{1/2}\|_2\||\mathrm{V}|^{1/2}\mathscr{R}_0(z)\|_2,$$

et :

$$\|\mathscr{R}_0(z)\mathrm{V}^{1/2}\|_2=\||\mathrm{V}|^{1/2}\mathscr{R}_0(z)\|_2=(4\pi)^{-2}\int\frac{|e^{i\sqrt{z}\|x-y\|}|^2\,|\mathrm{V}(y)|}{\|x-y\|^2}\,dx\,dy,$$

(où $\|\ \ \|_1$ est la norme trace, $\|\ \ \|_2$ la norme de Hilbert-Schmidt et $\|\ \ \|_\infty$ la norme d'opérateurs), où on choisit la racine carrée de z de partie imaginaire positive. Donc, sur γ, on a $\|\mathrm{A}(z)\|_1=\mathrm{O}(1)$; d'où l'on déduit la convergence de l'intégrale. L'égalité de $Z_1(t)$ avec cette intégrale se vérifie en testant sur les fonctions de $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$ dont la mesure spectrale par rapport à H est à support borné, en effet pour de telles fonctions, on peut refermer γ et appliquer la formule de Cauchy.

On écrit alors :

$$\mathrm{A}(z)=\mathscr{R}_0(z)\mathrm{V}\mathscr{R}_0(z)+(\mathrm{I}-\mathscr{R}_0(z)\mathrm{V})^{-1}(\mathscr{R}_0(z)\,\mathrm{V})^2\mathscr{R}_0(z),$$

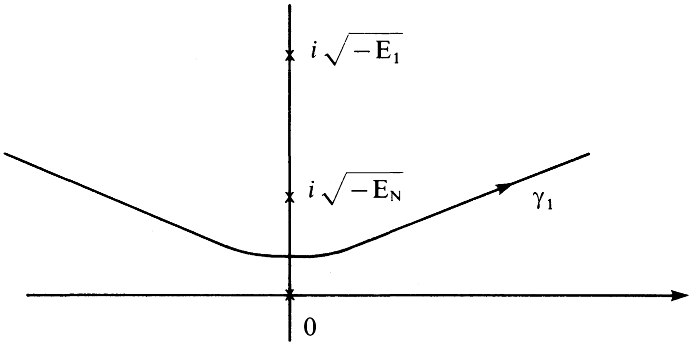
ce qui permet de séparer l'intégrale donnant $Z_1(t)$ en deux morceaux :

$$\mathrm{I}(t)=\frac{-1}{2i\pi}\int_\gamma e^{-tz}\,\mathrm{Tr}(\mathscr{R}_0(z)^2\,\mathrm{V})\,dz$$

et :

$$\mathrm{J}(t)=\frac{-1}{2i\pi}\int_{\gamma_1} e^{-tk^2}\,\mathrm{Tr}(\mathrm{I}-\mathrm{G}(k)\mathrm{V})^{-1}[\mathrm{G}(k)\mathrm{V}]^2\,\mathrm{G}(k)\,2k\,dk,$$

en posant $z=k^2$, Im $k>0$ et où γ_1 est le chemin représenté ci-dessous :



Calcul de $\mathrm{I}(t)$. — Le noyau de $[\mathcal{R}_0(z)]^2 \mathrm{V}$ est donné par :

$$\mathrm{A}(z;\, x,\, y)=(2\pi)^{-3}\int_{\mathbb{R}^3} e^{i(x-y|\xi)}(z-\|\xi\|^2)^{-2}\,\mathrm{V}(y)\,d\xi,$$

et donc :

$$\mathrm{Tr}([\mathcal{R}_0(z)]^2 \mathrm{V})=(2\pi)^{-3}\left(\int \mathrm{V}\right)\left(\int \frac{d\xi}{(z-\|\xi\|^2)^2}\right),$$

un calcul simple de résidus, montre alors que :

$$\mathrm{I}(t)=-(4\pi t)^{-3/2}\, t\left(\int \mathrm{V}\right).$$

Calcul de $\mathrm{J}(t)$. — D'après (1.5), on a :

$$\mathrm{J}(t)=\frac{-1}{2i\pi}\int_{\gamma_1} e^{-tk^2}\left[\frac{d}{dk}\,\mathrm{Log}\,\mathrm{D}(k)\right]dk.$$

Soit, en posant :

$$\delta(k)=\frac{d}{dk}\,\mathrm{Log}\,\mathrm{D}(k)$$

et en choisissant γ_1 tel que $-\gamma_1=\overline{\gamma_1}$ à l'orientation près :

$$\mathrm{J}(t)=\frac{-1}{4i\pi}\left(\int_{\gamma_1} e^{-tk^2}\,\delta(k)\,dk+\int_{\overline{\gamma_1}} e^{-tk^2}\,\delta(-k)\,dk\right),$$

$$\mathrm{J}(t)=\frac{-1}{4i\pi}\left\{\lim_{\alpha\to 0^+}\int_{|k|\geqq\alpha} e^{-tk^2}(\delta(-k)+\delta(k))\,dk\right.$$

$$\left.+\lim_{\alpha\to 0^+}\left(\int_{\gamma_{1,\alpha}} e^{-tk^2}\,\delta(k)\,dk+\int_{\overline{\gamma_{1,\alpha}}} e^{-tk^2}\,\delta(-k)\,dk\right)\right\},$$

où $\gamma_{1,\alpha}$ est le demi-cercle de centre 0 et de rayon $\alpha>0$ contenu dans $\operatorname{Im} k \geqq 0$. Utilisant la relation (1.6) sous la forme :

$$\frac{d}{dk} \operatorname{Log} \operatorname{dét} S(k) = \frac{-i}{2\pi} \int V - (\delta(k) + \delta(-k)),$$

il vient :

$$J(t) = \frac{1}{2i\pi} \int_0^\infty e^{-tk^2} \frac{d}{dk} \operatorname{Log} \operatorname{dét} S(k)\, dk + \frac{1}{4\pi^2} \int V \int_0^\infty e^{-tk^2}\, dk + \frac{2m+\varepsilon}{2},$$

où $2m+\varepsilon$ est l'ordre du zéro de $D(k)$ en 0.

Regroupant avec le calcul de $I(t)$, on obtient (2.1). Remarquons que cette formule contient le théorème de Levinson [N] en prenant quand $t \to 0^+$, la partie finie des deux membres. En utilisant les résultats du paragraphe 4, sur le développement asymptotique de $Z(t)$ quand $t \to 0^+$, on obtient :

$$0 = N' + \frac{\varepsilon}{2} + \frac{1}{2i\pi} \int_0^\infty \left(\frac{d}{dk} \operatorname{Log} \operatorname{dét} S(k) + \frac{i}{2\pi} \int V \right) dk,$$

soit, si :

$$\theta(k) = \operatorname{Arg} \operatorname{dét} S(k) + \frac{k}{2\pi} \int V,$$

(2.2) $$\theta(+\infty) - \theta(0) + 2\pi \left(N' + \frac{\varepsilon}{2} \right) = 0.$$

C'est ce résultat qui s'appelle théorème de Levinson.

3. Développement asymptotique de $D(k)$

Dans ce paragraphe 3, nous allons prouver que $D(k)$ admet quand $k \to \infty$, $\operatorname{Im} k \geqq 0$, *un développement asymptotique de la forme :*

(3.1) $$\operatorname{Log}(D(k)) \sim \sum_{j=2}^{\infty} c_j (ik)^{3-2j},$$

où $\operatorname{Log} D(k)$ est la détermination principale au voisinage de l'infini.

Remarque. — Par application de (1.6), on a donc aussi un développement asymptotique pour $\operatorname{Log} \operatorname{dét} S(k)$, $k \to +\infty$:

(3.2) $$\frac{d}{dk} \operatorname{Log} \operatorname{dét} S(k) \sim \frac{-i}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^3} V + 2i \sum_{j=2}^{\infty} (2j-3) c_j (ik)^{2-2j}.$$

La formule (3.1) résultera d'une formule de représentation intégrale et de la :

PROPOSITION 3.3. — Log $|D(k)|$ *est une fonction à décroissance rapide, ainsi que ses dérivées pour* $|k| \geqq k_0 > 0$, $k \in \mathbb{R}$.

Preuve. — En effet, on sait que $\lim\limits_{\substack{k \to \infty \\ \operatorname{Im} k \geqq 0}} \| K(k) \|\| = 0$ ((Z-K] ou [R.S], p. 390, problème 60), donc, pour k assez grand, $k \in \mathbb{R}$, on a :

$$\text{(3.4)} \qquad \operatorname{Log} D(k) = -\sum_{n=2}^{\infty} \operatorname{Tr}(K(k))^n / n \qquad \text{([S 2], p. 106).}$$

Or, on a :

$$\operatorname{Tr}(K(k)^n) = \frac{(-1)^n}{(4\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^{3n}} e^{ik(\|x_1 - x_2\| + \|x_2 - x_3\| + \ldots + \|x_n - x_1\|)} \frac{V(x_1) \ldots V(x_n)}{\|x_1 - x_2\| \ldots \|x_n - x_1\|} dx_1 \ldots dx_n.$$

Faisons le changement de variable :

$$\begin{cases} x_2 = x_1 + r\,\omega_2, \\ \vdots \\ x_n = x_{n-1} + r\,\omega_n = x_1 + r(\omega_2 + \ldots + \omega_n), \end{cases}$$

avec $\|\omega_2\| + \ldots + \|\omega_n\| + \|\omega_2 + \ldots + \omega_n\| = 1$, on obtient :

$$\operatorname{Tr}(K(k)^n) = \frac{(-1)^n}{(4\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^3} V(x_1)\, dx_1 \int_0^{\infty} e^{ikr} \Phi_n(x_1, r) r^{2n-4}\, dr,$$

avec :

$$\Phi_n(x_1, r) = \int_{\Sigma_n} \frac{V(x_1 + r\,\omega_2) \ldots V(x_1 + r(\omega_2 + \ldots + \omega_n))}{|\,\omega_2\| \ldots \|\omega_n\| . \|\omega_2 + \ldots + \omega_n\|} d\mu(\omega_i),$$

où Σ_n est le sous-ensemble compact de $\mathbb{R}^{3(n-1)}$ défini par :

$$\|\omega_2\| + \ldots + \|\omega_n\| + \|\omega_2 + \ldots + \omega_n\| = 1$$

et μ une mesure de Radon > 0 finie sur Σ_n.

Comme $V \in C_0^\infty$, il est clair que Φ_n est C^∞ en x_1 et r (($r \in \mathbb{R}$) et on a :

$$\text{(3.5)} \qquad \Phi_n(x_1, -r) = \Phi_n(x_1, r),$$

$$\text{(3.6)} \qquad \left| \frac{\partial^\alpha}{\partial r^\alpha} \Phi_n(x_1, r) \right| \leqq C_{\alpha, K} \frac{A^n}{n!}$$

pour $\alpha \in \mathbb{N}$, $x_1 \in K$ compact de $\mathbb{R}^3$. Pour prouver (3.6), il suffit en effet de prouver le :

LEMME 3.7. — *Soit :*

$$A_n = \int_{\Sigma_n} \frac{d\mu(\omega_i)}{\|\omega_2\| \ldots \|\omega_n\| \, \|\omega_2 + \ldots + \omega_n\|},$$

alors :

$$|A_n| \leqq C . \frac{B^n}{n!}.$$

Preuve de 3.7. — On a par construction $dx_2 \ldots dx_n = r^{3n-4}\, dr\, d\mu(\omega_i)$ et donc, si :

$$K_n = \{ \|x_2\| + \ldots + \|x_n\| + \|x_2 + \ldots + x_n\| \leqq 1 \},$$

on a :

$$I_n = \int_{K_n} \frac{dx_2 \ldots dx_n}{\|x_2\| \ldots \|x_n\| \, \|x_2 + \ldots + x_n\|} = \frac{1}{3(n-1)} A_n.$$

On a, par Cauchy-Schwarz :

$$I_n^2 \leqq \left(\int_{K_n} \frac{dx_2 \ldots dx_n}{\|x_2\|^2 \ldots \|x_n\|^2} \right) \left(\int_{K_n} \frac{dx_2 \ldots dx_n}{\|x_2 + \ldots + x_n\|^2} \right).$$

La première parenthèse se majore aisément par un passage en coordonnées polaires; pour la deuxième, on prend comme variable d'intégration $x_2, \ldots, x_{n-1}, z_n = x_2 + \ldots + x_n$ avant de passer en coordonnées polaires; on en déduit aisément le résultat annoncé.

Une fois obtenue (3.6), on remarque que la parité de Φ en r, implique que :

$$\operatorname{Log} |D(k)| = \frac{-1}{2} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(4\pi)^n . n} \int_{\mathbb{R}^3} V(x_1)\, dx_1 \int_{\mathbb{R}} e^{ikr} \Phi_n(x_1, r)\, r^{2n-4}\, dr.$$

D'où l'on conclut aisément la décroissance rapide en k. Le même raisonnement s'applique aux dérivées par rapport à k.

PROPOSITION 3.8. — *La fonction* $D(k)$ *admet pour* $\operatorname{Im} k > 0$, *la représentation intégrale :*

$$D(k) = \prod_{l=1}^{N} \frac{k - i\sqrt{-E_l}}{k + i\sqrt{-E_l}} \exp\left(-\frac{1}{i\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{\operatorname{Log}|D(t)|}{k-t}\, dt \right),$$

d'où l'on tire le développement asymptotique (3.1) *avec :*

$$(3.9) \qquad c_j = \frac{2}{2j-3} \left\{ \sum_{l=1}^{N} (-E_l)^{j-(3/2)} \right\} + (-1)^{j-1} \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Log}|D(t)|\, t^{2j-4}\, dt.$$

Preuve. — En effet, les deux membres de la formule de représentation intégrale sont holomorphes dans $\operatorname{Im} k > 0$, continus dans $\operatorname{Im} k \geqq 0$, ont les mêmes zéros avec même ordre dans $\operatorname{Im} k > 0$ et ont même module sur $\operatorname{Im} k = 0$ et à l'∞ : une utilisation simple du principe du maximum pour le quotient permet de conclure. La décroissance rapide de $\operatorname{Log} |D(t)|$ sur $\mathbb{R}$ permet alors de prouver l'existence du développement asymptotique et la formule (3.9). On peut noter l'analogie avec le cas de la dimension 1 traité par Faddeev et Zakharov [F-Z].

4. Développement asymptotique de $Z(t)$

Nous avons vu au paragraphe 2, que $e^{-tH}-e^{-tH_0}$ est un opérateur à trace, nous allons maintenant étendre la méthode classique de l'équation de la chaleur utilisée sur les variétés compactes [B-G-M] pour obtenir un développement asymptotique de cette trace quand $t \to 0^+$, on a le :

THÉORÈME 4.1. — *Soit $e(t, x, y)(t>0)$ le noyau de e^{-tH}, alors quand $t \to 0^+$, $e(t, x, x)$ admet le développement asymptotique :*

$$e(t, x, x) \sim (4\pi t)^{-3/2}(1+ta_1(x)+\ldots+t^j a_j(x)+\ldots),$$

où les $a_j(x)$ sont de la forme :

$$a_j(x)=P_j(V(x), DV(x), \ldots, D^\alpha V(x)).$$

Les P_j sont des polynômes universels en V et ses dérivées au point x, invariant par l'action de $O(3)$ sur l'espace des jets et ont la propriété d'homogénéité :

$$P_j(\lambda V, \lambda^{3/2} DV, \ldots, \lambda^{1+(|\alpha|/2)} D^\alpha V)=\lambda^j P_j(V, DV, \ldots, D^\alpha V).$$

De plus, ce développement asymptotique peut s'intégrer terme à terme et on obtient :

$$Z(t)=\mathrm{Tr}(e^{-tH}-e^{-tH_0}) \sim (4\pi t)^{-3/2}(a_1 t+a_2 t^2+\ldots),$$

avec :

$$a_j=\int_{\mathbb{R}^3} P_j(V(x), DV(x), \ldots, D^\alpha V(x))\, dx.$$

La première partie du théorème est tout à fait classique (*voir* par exemple [B-G-M] pour le cas du laplacien sur une variété riemannienne ou [K-M] pour le cas de l'équation de Schrödinger sur $\mathbb{R}$). La seule difficulté est de montrer qu'on peut intégrer ce développement asymptotique sur $\mathbb{R}^3$, cela résulte du :

LEMME 4.2. — *On a l'estimation :*

$$|e(t, x, y)-e_0(t, x, y)| \leqq C.\exp\left(-\frac{d(x, K)^2}{4t}\right),$$

où $K=$ Support de V et $d(x, K) \geqq \alpha>0$, α fixé et $0<t \leqq 1$.

Preuve. — Nous prouvons ce lemme par application de la formule de Feynman-Kac :

$$e(t, x, y)=E_t^{xy}\left(\exp\left(-\int_0^t V(x(s))\, ds\right)\right).$$

Donc, on a :

$$|e(t, x, y)-e_0(t, x, y)| \leqq C.E_t^{xy}(\text{mes}\{s \mid x(s) \in \text{Support}(V)\}).$$

Soit, par Fubini :

$$|e(t, x, y)-e_0(t, x, y)| \leqq C.\int_0^t ds.E_t^{xy}(\|x(s)-x\| \geqq d(x, K)).$$

Cette dernière intégrale se calcule facilement et donne le lemme.

Remarques sur le calcul des P_j. — Pour le calcul des P_j $(1 \leqq j \leqq 4)$, on utilise les propriétés d'invariance par O (3) et d'homogénéité, ainsi que le fait qu'on connaît la valeur des P_j sur les jets de la forme $V_1(x_1)+V_2(x_2)+V_3(x_3)$: en effet, si :

$$H_i = -\frac{d^2}{dx_i^2}+V_i(x_i).$$

on connaît les coefficients du développement asymptotique du noyau $e_i(t, x_i, x_i)$ de e^{-tH_i} [K-M] et on a $e^{-tH}=e^{-tH_1}\otimes e^{-tH_2}\otimes e^{tH_3}$. Utilisant ces deux remarques, on retrouve :

j	P_j	a_j
1....	$-V$	$-\int V\,dx$
2....	$\frac{1}{2}(V^2-\Delta V)$	$\frac{1}{2}\int V^2\,dx$
3....	$-\frac{1}{6}\left(V^3-\frac{1}{2}\|DV\|^2-V\Delta V+\frac{1}{10}\Delta^2 V\right)$	$-\frac{1}{6}\int\left(V^3+\frac{1}{2}\|DV\|^2\right)dx$
4....	$\frac{1}{24}\left(V^4-2V\|DV\|^2-2V^2\Delta V+\frac{13}{5}\|\Delta V\|^2 -2\|D^2V\|^2+\frac{4}{5}\langle DV\mid D\Delta V\rangle+\frac{2}{5}V\Delta^2V-\frac{1}{35}\Delta^3 V\right)$	$\frac{1}{24}\int\left(V^4+2V\|DV\|^2+\frac{11}{5}\|\Delta V\|^2-2\|D^2V\|\right)^2 dx$

Cette méthode ne s'applique plus pour $j \geqq 5$, car il existe alors des invariants du type considéré qui sont nuls sur les $V_1(x_1)+V_2(x_2)+V_3(x_3)$: par exemple si E est l'espace vectoriel des polynômes homogènes de degré 3 à 3 variables et si on pose :

$$Q_1(P)=\int_{S^2}|P|^2\,d\sigma, \qquad Q_2(P)=\int_{S^2}|\Delta P|^2\,d\sigma,$$

on a, pour :

$$V=ax_1^3+bx_2^3+cx_3^3, \qquad Q_2=14\,Q_1.$$

Donc :

$$Q_3(P)=\int_{S^2}(|\Delta P|^2-14|P|^2)\,d\sigma$$

est un polynôme homogène de degré 2 sur E, nul sur les jets diagonaux considérés. Q_3 a le type à invariance de P_5 qui n'est donc pas calculable par la méthode indiquée.

5. Relations entre les développements asymptotiques

Nous allons utiliser la formule de traces (2.1) pour obtenir une relation entre les développements asymptotiques :

$$\text{(3.2)} \qquad \frac{d}{dk} \operatorname{Log} \text{dét } S(k) \sim \frac{-i}{2\pi} \int V + 2i \sum_{j=2}^{\infty} (2j-3) c_j (ik)^{2(1-j)},$$

et :

$$\text{(4.1)} \qquad Z(t) = \operatorname{Tr}(e^{-tH} - e^{-tH_0}) \sim (4\pi t)^{-3/2} \left(\sum_{j=1}^{\infty} a_j t^j \right).$$

THÉORÈME 5.1. — *On a, pour* $j \geqq 2$,

$$a_j = (-1)^j 8 \sqrt{\pi}\, \Gamma\left(\frac{5}{2} - j\right) c_j.$$

Ce théorème résulte immédiatement de l'application à (2.1) du :

LEMME 5.2. — *Soit* $f(k)$ *une fonction continue sur* $[0, +\infty[$ *admettant quand* $k \to +\infty$ *un développement asymptotique de la forme* $f(k) \sim \sum_{j=0}^{\infty} a_j k^{\mu_j}$, *avec* $\mu_1 > \mu_2 > \ldots$ *et* $F(t) = \int_0^{+\infty} e^{-tk^2} f(k)\, dk$ $(t>0)$, *alors* $F(t)$ *admet, quand* $t \to 0^+$, *un développement asymptotique de la forme :*

$$F(t) = \frac{1}{2} \sum_j{}' a_j \Gamma\left(\frac{\mu_j + 1}{2}\right) t^{-(\mu_j+1)/2} + \frac{\operatorname{Log} t}{2} \sum_j{}'' (-1)^{(\mu_j - 1)/2} a_j t^{-(\mu_j+1)/2} + \sum_{l=0}^{\infty} b_l t^l,$$

où $\sum_j{}'$ *est la somme pour* $\mu_j \notin \{-1, -3, -5, \ldots\}$ *et* $\sum_j{}''$ *la somme pour* $\mu_j \in \{-1, -3, -5, \ldots\}$. *Les* b_l *ne sont pas déterminés par les* a_j.

On remarque qu'il est facile de déterminer la partie du développement asymptotique correspondant aux $\mu_j > -1$ en utilisant la définition usuelle de Γ. Pour s'y ramener, il suffit alors de chercher le développement asymptotique des dérivées $F^{(\alpha)}(t)$, puis d'intégrer ces développements asymptotiques.

Utilisant la formule (3.9), on obtient les relations :

$$\text{(5.3)} \qquad \sum_{l=1}^{N} |E_l|^{j-(3/2)} = C_j . a_j + (-1)^j \frac{2j-3}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Log} |D(t)| . t^{2j-4}\, dt \qquad (j \geqq 2),$$

avec :

$$C_j^{-1} = (-1)^j \frac{16\sqrt{\pi}}{2j-3} \Gamma\left(\frac{5}{2} - j\right).$$

Ces relations sont tout à fait analogues à celles obtenues en dimension 1 dans [F-Z] où $|D(t)|$ est remplacé par $1-|R(t)^2$ où R est le coefficient de réflexion de la matrice de scattering; il est donc naturel de se demander si on ne peut pas utiliser (5.3) pour obtenir des inégalités du type :

$$\left\{\begin{array}{ll}\sum_{l=1}^{N} |E_l|^{j-(3/2)} \leqq C_j . a_j & \text{pour } j \text{ pair,} \\ \sum_{l=1}^{N} |E_l|^{j-(3/2)} \geqq C_j . a_j & \text{pour } j \text{ impair,}\end{array}\right. \tag{5.4}$$

qui résulteraient par exemple de $|D(t)| \leqq 1$; les inégalités du type :

$$\sum_{l=1}^{N} |E_l|^{j-(3/2)} \leqq D_j \int |V(x)|^j \, dx,$$

ont été beaucoup étudiées, notamment pour $j=3/2$ ([G-M-G-T], [S 3], [L-T], ...).

Malheureusement, quelques essais numériques, résumés dans le tableau ci-dessus nous ont montré que l'inégalité (5.4) est fausse, au moins pour $j=2$, où elle s'écrit :

$$\sum_{l=1}^{N} |E_l|^{1/2} \leqq \frac{1}{32\pi} \int V^2 .$$

On étudie des potentiels du type $V(x) = -\lambda e^{-\|x\|}$ en utilisant les tables de [L-T].

λ	$\sum \lvert E_l \rvert^{1/2}$	$\frac{1}{32\pi}\int V^2 - \frac{\lambda^2}{32}$	$\sum (E_l)^{3/2}$	$\frac{-1}{64\pi}\int V^3 + \frac{1}{2}\lVert DV \rVert^2 = \frac{1}{16}\left(\frac{2\lambda^3}{27} - \frac{\lambda^2}{4}\right)$
5......	0,741 84	0,781 25	0,408 2	0,188
10	3,475 08	3,125	3,822	3,067
20......	13,300 06	12,5	33,786	30,787
30......	27,143 3	28,125	117,52	110,93

Il est possible que les inégalités (5.4) soient vraies pour $j \geqq 3$. Nous avons également vérifiées que ces inégalités sont compatibles avec las asymptotiques quasi-classiques obtenues en remplaçant V par λV et en faisant tendre λ vers $+\infty$.

BIBLIOGRAPHIE

[A-S] P. ALSHOLM et G. SCHMIDT, *Spectral and Scattering Theory for Schrödinger Operators* (*Arch. Rat. Mech. Anal.*, vol. 40, 1971, p. 281-311).

[B] V. S. BUSLAEV, *Scattered Plane waves, Spectral Asymptotics and Trace Formulas in Exterior Problems* (*Dokl. Akad. Nauk S.S.S.R.*, vol. 197, 1971, p. 591-595).

[B-G-M] M. BERGER, P. GAUDUCHON et E. MAZET, *Le spectre d'une variété riemannienne* (*Lecture Notes in Math.*, vol. 194, 1971).

[B-K] M. S. BIRMAN et M. G. KREIN, *On the Theory of wave Operators and Scattering Operators* (*Dokl. Akad. Nauk S.S.S.R.*, vol. 144, 1962, p. 475-478).

[CV] Y. COLIN DE VERDIÈRE, *Spectre du laplacien et longueurs des géodésiques périodiques II* (*Compositio Mathematica*, vol. 27, 1973, p. 159-184).

[F-Z] P. FADDEEV et V. ZAKHAROV, *KdV Equation: a Completely Integrable Hamiltonian System* (*Funct. Anal. and Appl.* vol. 5, 1971, p. 280-288).

[G-M-G-T] V. GLASER, A. MARTIN, H. GROSSE et W. THIRRING, *A Family of Optimal Conditions for the Absence of Bound States in a Potential. Studies in Math. Phys.*, LIEB, SIMON et WIGHTMANN, éd., Princeton, 1976, p. 169-194.

[J-K] A. JENSEN et T. KATO, *Asymptotic behaviour of the Scattering Phase for Exterior Domains* (*Comm. P.D.E.*, vol. 3, 1978, p. 1165-1195).

[K-M] H. P. McKEAN et VAN MOERBECKE, *The Spectrum of Hill's Equation* (*Invent. Math.*, vol. 30, 1975, p. 217-254).

[L-P 1] P. LAX et R. S. PHILLIPS, *Scattering Theory for Automorphic Functions* (*Annals Math. Studies*, 1976, Princeton).

[L-P 2] P. LAX et R. S. PHILLIPS, *The Time Delay Operator and a Related Trace Formula. Topics in Functional Analysis*, GOHBERG et M. KAC, ed., Academic Press, 1978, p. 197-215.

[L-T] E. LIEB et W. THIRRING, *Inequalities for the Moments of the Eigenvalues of the Schrödinger Hamiltonian... Studies in Math. Phys.*, LIEB, SIMON et WIGHTMANN, éd., Princeton, 1976, p. 269-304.

[M R] A. MAJDA et J. RALSTON, *An Analogue of Weyl's Theorem for Unbounded Domains I, II et III* (*Duke Math. J.*, vol. 45, p. 183-196 et 513-536; vol. 46, 1979, p. 725-731).

[N] R. NEWTON, *Non Central Potentiels: the Generalized Levinson Theorem and the Structure of the Spectrum* (*J. Math. Phys.*, vol. 18, 1977, p. 1348-1357).

[R-S] M. REED et B. SIMON, *Scattering Theory*, Academic Press, 1979.

[S 1] B. SIMON, *Quantum Mechanics for Hamiltonians defined as Quadratic Forms*, Princeton, 1971.

[S 2] B. SIMON, *Trace Ideals and their Applications*, Cambridge, 1979.

[S 3] B. SIMON, *On the Number of Bound States of the Two-Body Schrödinger Operators. A review. Studies in Math. Phys.*, LIEB, SIMON et WIGHTMANN, éd., Princeton, 1976, p. 305-326.

[Z-K] C. ZEMACH et A. KLEIN, *The Born Expansion in non Relativistic Quantum Theory*, I (*Nuovo Cimento*, vol. 10, 1958, p. 1078-1087).

(Manuscrit reçu le 28 février 1980,
révisé le 25 juin 1980.

Y. COLIN DE VERDIÈRE,
Institut Fourier,
Université de Grenoble-I,
B.P. n° 116,
38402 Saint-Martin-d'Hères.