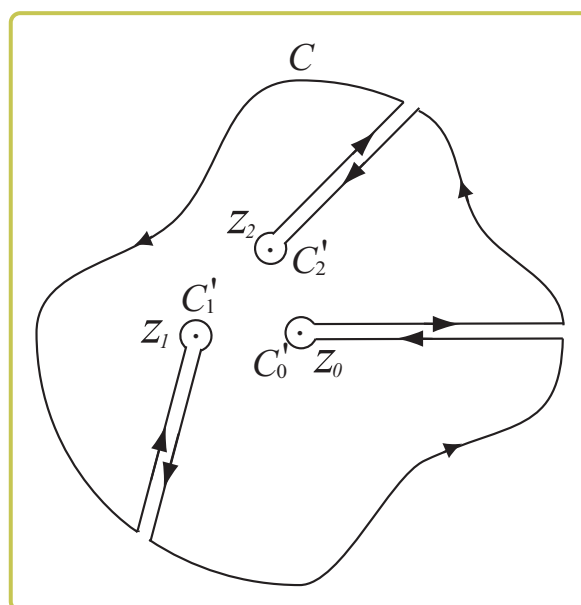


MÉTHODES DE PHYSIQUE THÉORIQUE

PHQ 505



Claude Bourbonnais

Département de physique

Faculté des sciences

Université de Sherbrooke

30 août 2020

Table des matières

1	Analyse complexe	5
1.1	Nombres et fonctions complexes	5
1.2	Dérivation, fonctions analytiques et conditions Cauchy-Reimann	11
1.3	Intégration dans le plan complexe	18
1.3.1	Intégration curviligne	18
1.3.2	Propriétés des intégrales	19
1.3.3	Théorème de Cauchy	20
1.3.4	Formule intégrale de Cauchy	22
1.3.5	Séries de Taylor et de Laurent	23
1.3.6	Théorème des résidus	28
1.3.7	Évaluation d'intégrales définies	33
1.4	Sommation de séries	41
1.5	Transformations de Hilbert et relations de Kramers-Kronig	43
1.6	Méthode du col	46
2	Équations différentielles	51
2.1	Quelques équations de la physique des milieux continus	51
2.1.1	Équation d'onde	51
2.1.2	Équations de l'électromagnétisme	52
2.1.3	Équation de diffusion	54
2.1.4	Équation de Schrödinger	55
2.2	Équations différentielles du second ordre à coefficients non constants : solutions sous forme de série	56
2.2.1	Solutions en séries : points réguliers	57
2.2.2	Recherche d'une seconde solution : méthode du Wronskien	62
2.2.3	Équations à points réguliers singuliers, équation indicelle	63
2.3	Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville	71
2.3.1	Corde vibrante	72
2.3.2	Formulation générale du problème de Sturm-Liouville	74
2.3.3	Équation de Bessel et conditions aux limites	77
2.3.4	Équation de Laplace en coordonnées sphériques et polynômes de Legendre	81
2.3.5	Équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène : fonctions de Legendre et Laguerre associées	85

Table des matières

1

Analyse complexe

1.1 Nombres et fonctions complexes

La première confrontation à la limitation des nombres réels est venue de la recherche de solutions à certaines équations algébriques du second degré. Considérons par exemple l'équation suivante

$$x^2 + x + 1 = 0, \quad (1.1)$$

qui selon le tracé donné à la Fig. 1.1 ne croise pas l'axe des x et n'admet donc pas de solution dans \mathbb{R} . Si on

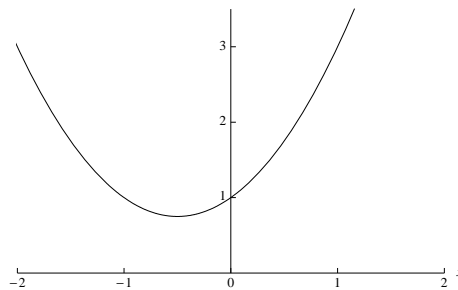


FIGURE 1.1

Tracé de $x^2 + x + 1$ montrant l'absence de zéro sur l'axe des réels x .

applique néanmoins la méthode du discriminant, les solutions sont de la forme

$$x = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{-3}, \quad (1.2)$$

faisant ainsi apparaître la racine d'un nombre négatif, racine ne faisant évidemment pas partie des nombres réels. En utilisant la propriété de la racine d'un produit de deux nombres réels a et b , à savoir $\sqrt{ab} = \sqrt{a}\sqrt{b}$, on voit immédiatement que toute racine d'un nombre négatif s'exprime invariablement sous la forme $\sqrt{b}\sqrt{-1}$, où b est réel et positif. On définira

$$i \equiv \sqrt{-1}, \quad (1.3)$$

non plus comme un nombre réel, mais plutôt l'élément de base des nombres dits *imaginaires*^{1, 2}, avec la propriété

$$i^2 = -1. \quad (1.4)$$

1. L'introduction de nombres complexes dans la solution d'équations polynomiales s'est faite à partir du XVI^e siècle, notamment par Jérôme Cardan et Raphaël Bombelli.

2. L'identification $i \equiv \sqrt{-1}$, due à Euler, est apparue un peu plus tard et a permis de lever un certain nombre d'ambiguïtés.

Chapitre 1. Analyse complexe

On introduira la *variable complexe*

$$z = x + iy, \quad (1.5)$$

qui consiste en une partie réelle x ($\equiv \operatorname{Re} z$) et une partie imaginaire y ($\equiv \operatorname{Im} z$), x et y étant réels. Dans l'exemple ci-dessus, les racines sont $z_{\pm} = -\frac{1}{2} \pm \frac{i}{2}\sqrt{3}$.

L'ensemble des z définit le corps des complexes \mathbb{C} , lequel obéit aux règles suivantes :

$$\text{addition (soustraction)} : \quad (x_1 + iy_1) \pm (x_2 + iy_2) = (x_1 \pm x_2) + i(y_1 \pm y_2), \quad (1.6)$$

$$\text{multiplication} : \quad (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = x_1x_2 - y_1y_2 + i(x_1y_2 + x_2y_1), \quad (1.7)$$

$$\text{division} : \quad \frac{x_1 + iy_1}{x_2 + iy_2} = \frac{x_1x_2 + y_1y_2 + i(y_1x_2 - x_1y_2)}{x_2^2 + y_2^2}. \quad (1.8)$$

On peut donner une représentation géométrique des nombres complexes³ dans un espace à deux dimensions. Ainsi $z = x + iy$ peut se représenter comme le couple (x, y) dans un plan – le plan complexe ou plan d'Argand-Cauchy – pour lequel l'axe y (et non iy) est appelé axe imaginaire et l'axe x , l'axe réel. Ainsi la somme ou la différence de deux nombres complexes z_1 et z_2 est l'analogie d'une somme de vecteurs dans \mathbb{R}^2 .

Une opération importante sur les nombres complexes est la *conjugaison complexe* qui est définie comme suit

$$z^* = x - iy, \quad (1.9)$$

où seule la partie imaginaire change de signe. La représentation géométrique de z^* montre que l'opération de conjugaison complexe $z \rightarrow z^*$ équivaut à une réflexion par rapport à l'axe des réels. On vérifie aisément que la conjugaison complexe est compatible avec les propriétés suivantes :

$$(z^*)^* = z, \quad (1.10)$$

$$|z|^2 \equiv zz^* = x^2 + y^2, \quad (1.11)$$

$$(z_1 + z_2)^* = z_1^* + z_2^*, \quad (1.12)$$

$$(z_1 z_2)^* = z_1^* z_2^*, \quad (1.13)$$

$$\frac{z + z^*}{2} = \operatorname{Re} z, \quad (1.14)$$

$$\frac{z - z^*}{2i} = \operatorname{Im} z. \quad (1.15)$$

Maintenant pour satisfaire l'équation

$$z_1 = z_2, \quad (1.16)$$

on doit avoir l'égalité des parties réelle et imaginaire, à savoir

$$\operatorname{Re} z_1 = \operatorname{Re} z_2 \quad (1.17)$$

$$\operatorname{Im} z_1 = \operatorname{Im} z_2. \quad (1.18)$$

$$(1.19)$$

De même pour une équation faisant intervenir les fonctions f_1 et f_2 , l'égalité

$$f_1(z_1) = f_2(z_2), \quad (1.20)$$

implique la double égalité

$$\operatorname{Re} f_1(z_1) = \operatorname{Re} f_2(z_2), \quad (1.21)$$

$$\operatorname{Im} f_1(z_1) = \operatorname{Im} f_2(z_2). \quad (1.22)$$

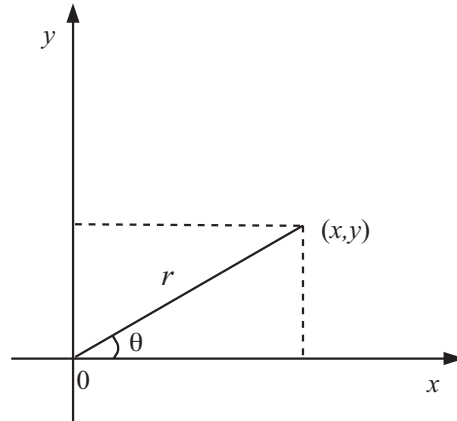


FIGURE 1.2

Représentation polaire de z dans le plan complexe.

Représentation polaire. – À l'aide des fonctions circulaires, le couple de coordonnées cartésiennes (x, y) associé à z dans le plan complexe peut s'exprimer en fonction du module (ou valeur absolue) r et de l'angle (ou phase) θ du nombre complexe (Fig. 1.2) :

$$z = r \cos \theta + ir \sin \theta. \quad (1.23)$$

Ainsi z a une représentation dite polaire caractérisée par le couple (r, θ) .

Maintenant, si nous prolongeons la définition de l'exponentielle e^x par sa série entière dans le plan complexe, soit en substituant $i\theta$ à x , et qu'on utilise les propriétés des puissances paire et impaire de i , à savoir $i^2 = -1, i^3 = -i$, etc., on trouve

$$\begin{aligned} e^{i\theta} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!} \\ &= \left(1 - \frac{\theta^2}{2} + \frac{\theta^4}{4!} + \dots\right) + i\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots\right). \end{aligned} \quad (1.24)$$

Par cette séparation en parties réelle et imaginaire, on reconnaît les développements en série des fonctions circulaires pour la variable réelle θ , ce qui donne

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta, \quad (1.25)$$

connue sous le nom de *formule d'Euler*. La représentation polaire de tout nombre complexe z peut donc s'écrire

$$\boxed{z = r e^{i\theta}}. \quad (1.26)$$

La formule de De Moivre suit avec l'expression

$$z^n = [r(\cos \theta + i \sin \theta)]^n = r^n (\cos n\theta + i \sin n\theta), \quad (1.27)$$

qui est équivalent à $z^n = (r e^{i\theta})^n = r^n e^{in\theta}$. Toujours à l'aide de (1.25), on déduit aisément quelques *identités d'Euler*,

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}, \quad \sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i},$$

3. La représentation géométrique des nombres complexes a été initiée par le mathématicien non professionnel, Jean-Robert Argand (1745-1818), au début du 19^e siècle et reprise par la suite par Gauss et Cauchy.

$$\tan \theta = -i \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}, \quad \cot \theta = i \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{e^{i\theta} - e^{-i\theta}},$$

etc. (1.28)

On peut généraliser ces expressions pour un z quelconque et obtenir les fonctions circulaires dans le plan complexe

$$\begin{aligned} \cos z &= \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{2}, & \sin z &= \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i}, \\ \tan z &= -i \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{e^{iz} + e^{-iz}}, & \cot z &= i \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{e^{iz} - e^{-iz}}, \end{aligned}$$

etc. (1.29)

En utilisant le développement de l'exponentielle, nous obtenons le développement des fonctions circulaires,

$$\cos z = 1 - \frac{z^2}{2!} + \frac{z^4}{4!} - \dots, \quad (1.30)$$

$$\sin z = z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} - \dots. \quad (1.31)$$

$$(1.32)$$

On déduit également à partir de (1.29) un lien entre les fonctions circulaires et les fonctions hyperboliques, à savoir

$$\begin{aligned} \cos iz &= \frac{e^z + e^{-z}}{2}, \\ &= \cosh z, \end{aligned} \quad (1.33)$$

$$\begin{aligned} \sin iz &= \frac{e^{-z} - e^z}{2i}, \\ &= i \sinh z, \end{aligned} \quad (1.34)$$

$$\text{etc.,} \quad (1.35)$$

auxquelles nous pouvons associer les séries en puissance

$$\cosh z = 1 + \frac{z^2}{2!} + \frac{z^4}{4!} + \dots, \quad (1.36)$$

$$\sinh z = z + \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} + \dots. \quad (1.37)$$

On peut alors démontrer aisément les égalités suivantes

$$\begin{aligned} \sinh iz &= i \sin z, & \cosh iz &= \cos z, \\ \tan iz &= i \tanh z, & \tanh iz &= i \tan z. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Séries en puissance et disque de convergence Si on considère une fonction $f(z)$ définie à l'aide d'un développement en puissance

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n. \quad (1.39)$$

En fonction des valeurs données à z , $f(z)$ peut prendre des valeurs *finies* (pour ses parties réelle et imaginaire) et la série est alors *convergente*. Dans le cas où elle prend des valeurs *infinies*, elle est dite *divergente*. La convergence

de la série nous renseigne essentiellement sur la région du plan complexe où les propriétés de la fonction sont bien définies. À l'instar des fonctions de variables réelles, il existe plusieurs critères pour déterminer si une série est convergente ou non. Dans ce paragraphe, nous nous limiterons à un test fréquemment utilisé, soit celui du quotient, appelé aussi critère d'Alembert ou de Gauss. On définit le rapport de deux éléments successifs de la série par l'expression,

$$\rho_n = \left| \frac{a_{n+1}z^{n+1}}{a_n z^n} \right|. \quad (1.40)$$

Dans la limite $n \rightarrow \infty$, nous distinguons trois cas possibles,

$$\rho_{n \rightarrow \infty} \rightarrow \rho \begin{cases} < 1, & \text{pour une série avec convergence absolue,} \\ = 1, & \text{autre test nécessaire,} \\ > 1, & \text{pour une série divergente,} \end{cases} \quad (1.41)$$

où pour $\rho < 1$, la série converge⁴, alors que pour $\rho > 1$ la série diverge. Lorsque $\rho = 1$, on ne peut conclure à partir de ce critère et un autre test doit être appliqué. Nous serons amenés à considérer de façon générale la région $\rho < 1$, laquelle définit un *disque de convergence* de la série ; on utilise également le terme *rayon de convergence*.

Exemple 1.1 :

Prenons l'exemple de la série alternée,

$$1 - z + \frac{z^2}{2} - \frac{z^3}{3} + \dots (-1)^n \frac{z^n}{n} + \dots \quad (1.42)$$

Dans ce cas $\rho = |z|$, et donc la série converge pour $|z| < 1$, ce qui correspond à un disque de rayon unité.

Exemple 1.2 :

Soit maintenant la série en puissance pour la fonction exponentielle

$$e^z = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \dots \frac{z^n}{n!} + \dots \quad (1.43)$$

On a dans ce cas

$$\rho = \left| \frac{z}{n+1} \right|_{n \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \text{ pour } |z| < \infty. \quad (1.44)$$

Le rayon de convergence tend vers l'infini et la fonction exponentielle est alors convergente pour tout z fini.

On termine ce paragraphe en considérant la série géométrique que l'on rencontrera fréquemment

$$S_n = a + az + az^2 + \dots az^{n-1}, \quad (1.45)$$

où a est une constante. Multipliant S_n par z , sa soustraction de S_n permet d'écrire

$$S_n - zS_n = a(1 - z^n),$$

ce qui donne

$$S_n = \frac{a(1 - z^n)}{1 - z}. \quad (1.46)$$

Le test du quotient conduit à $\rho = |z|$ et la série est convergente pour $|z| < 1$. Dans un tel cas, la progression géométrique devient

$$S_{n \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{a}{1 - z}. \quad (1.47)$$

4. La série a une convergence dite absolue si $\sum_n |a_n z|^n$ converge. Dans un tel cas, $\sum_n a_n z^n$ converge nécessairement.

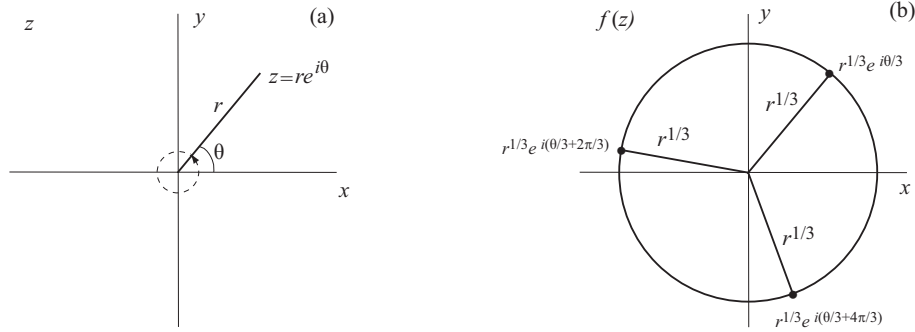


FIGURE 1.3

(a) : Plan de la variable z ; (b) : plan de $f(z)$.

Fonctions multiformes et points de branchement Considérons la fonction de la variable complexe

$$f(z) = \sqrt[3]{z}. \quad (1.48)$$

Contrairement au cas d'une variable réelle, cette fonction racine de la variable complexe z n'est pas univalente, i.e., elle possède plus d'une valeur en un point. Pour s'en convaincre, on peut utiliser dans un premier temps la représentation polaire (1.26) de z ,

$$z = e^{i(\theta+2n\pi)}. \quad (1.49)$$

Celle-ci prend des valeurs identiques pour un facteur de phase $2n\pi$ près ($n = 0, 1, 2, \dots$) égal à l'unité, ce qui correspond à une rotation de 0, 1, 2, etc., tours complets dans le plan complexe, lesquels nous ramènent au même point z (fig. 1.3-a), en raison de la périodicité des fonctions circulaires en (1.25). Maintenant, si on regarde les valeurs de $f(z)$ en fonction n et ce, jusqu'à $n = 3$, on a respectivement $r^{1/3} e^{i\theta/3}$, $r^{1/3} e^{i(\theta/3+2\pi/3)}$, $r^{1/3} e^{i(\theta/3+4\pi/3)}$, et $r^{1/3} e^{i(\theta/3+6\pi/3)}$. Les trois premières expressions correspondent à des points différents sur un cercle de rayon $r^{1/3}$ dans le plan complexe de $f(z)$ (fig. 1.3-b), alors que la quatrième valeur est égale à la première. Il y a donc trois valeurs différentes de la fonction en un même point z : $f(z)$ est donc multi-évaluée. Cette périodicité '3' se répète à l'infini en fonction de n . La fonction $f(z)$ est aussi appelée *multiforme* par opposition à une fonction *uniforme* avec une seule valeur $\forall n$.

Cependant, si l'angle θ de z est restreint à l'intervalle $0 \leq \theta < 2\pi$, sans jamais toucher 2π , alors la fonction demeure uniforme. Cet intervalle définit alors la *branche principale* ou encore le *feuillet principal* de la fonction. On pourrait de la même manière définir un deuxième feuillet d'uniformité de la fonction pour l'intervalle $2\pi \leq \theta < 4\pi$, lequel inclut 2π , mais exclut 4π . Un troisième et dernier feuillet est possible pour l'intervalle $4\pi \leq \theta < 6\pi$. Ainsi, dans notre exemple, $\sqrt[3]{z}$ possède trois feuillets.

Dans cet exemple, le point $z = 0$ par lequel passe l'axe de rotation est appelé *point de branchement* ou *point de ramification* (\times de la Fig. 1.4-a). Toute rotation de 2π autour de ce point donnera invariablement lieu à une évaluation multiple. On peut s'en convaincre en prenant n'importe quel autre point z_0 à distance finie (Fig. 1.4-a). Une rotation de 2π autour et suffisamment près de ce point ne change pas la phase de la variable z et donc la valeur de la fonction ; ce n'est donc pas un point de branchement de la fonction considérée. Maintenant, est-ce que $z = 0$ est le seul point de branchement ? En fait, il en existe un autre, mais pas à distance finie. Si on pose, par exemple $z = 1/w$, on a $f(w) = w^{-1/3}$, on voit par la même analyse que ci-dessus que $f(w)$ a un point de branchement à $w = 0$, ce qui correspond à $|z| = \infty$. Il y a donc un autre point de branchement à l'infini qui peut être placé à n'importe quel endroit sur un cercle de rayon infini.

Coupures La localisation des points de branchement permet de définir une ligne dans le plan complexe appelée ligne de *coupure*. C'est une ligne qui *relie deux points de branchement*. Une coupure est une frontière linéaire à ne pas franchir afin d'assurer l'uniformité de la fonction ; elle est donc intimement liée aux intervalles définissant les feuillets. Ainsi, au feuillet principal d'intervalle $0 \leq \theta < 2\pi$, correspond la ligne de coupure de l'axe des x positifs, reliant $z = 0$ à l'infini (Fig. 1.4-b). Ceci nous amène au choix de la coupure, lequel est lié

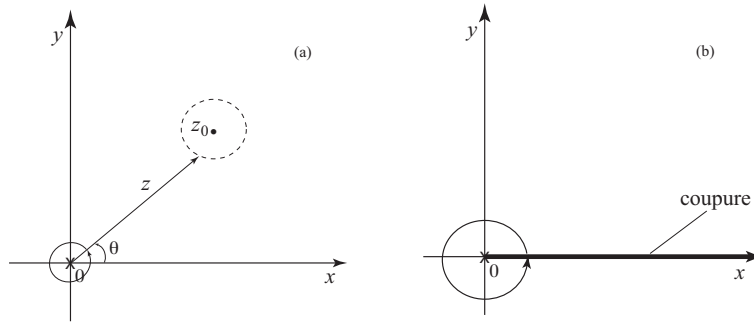


FIGURE 1.4

(a) : Rotation de $2n\pi$ de z autour de l'origine menant à des valeurs différentes de la fonction multiforme $f(z) = \sqrt[3]{z}$. L'origine est un point de branchement (x) de la fonction, contrairement à tout point z_0 à distance finie par rapport auquel une rotation de $2n\pi$ conserve la phase θ de z ; (b) : Ligne de coupure (trait épais) de $f(z)$ pour le choix d'intervalle $0 \leq \theta < 2\pi$ du feuillet principal.

à celui de l'intervalle pour un feuillet. Pour le feuillet principal par exemple, on aurait pu utiliser l'intervalle $-\pi < \theta \leq \pi$, lequel est tout aussi acceptable pour assurer l'uniformité de la fonction. Dans ce cas, la ligne partant de l'origine vers $-\infty$ sur l'axe des x définit la ligne de coupure. Un choix d'intervalle différent comme par exemple, $\pi/4 \leq \theta < 9\pi/4$, pour la branche principale, conduirait à une ligne de coupure partant de l'origine vers l'infini avec un angle de $\pi/4$; il y a donc une infinité de choix possibles.

On termine ce paragraphe avec la fonction logarithmique $f(z) = \ln z$. On voit immédiatement que c'est aussi une fonction multiforme : en substituant (1.49), on trouve en effet

$$\ln z = \ln r + i\theta + i2n\pi . \quad (1.50)$$

La fonction ne retrouve pas sa valeur initiale après une rotation d'un multiple de 2π de la variable z . Contrairement à une fonction du type $\sqrt[N]{z}$ pour N fini, le logarithme admet une infinité de feuillets et ne retrouve jamais sa valeur initiale⁵. Les points de branchement sont également situés à $z = 0$ et à l'infini.

Nous verrons que la détermination des points de branchement ainsi que les lignes de coupure sont d'une grande importance lors de l'intégration de fonctions multiformes. Les points de branchement sont utiles pour délimiter des parcours d'intégration dans des régions où la fonction prise en général à l'intérieur du feuillet principal, demeure uniforme.

1.2 Dérivation, fonctions analytiques et conditions Cauchy-Reimann

On appellera $f(z)$, une fonction de la variable complexe $z = x + iy$. Cette fonction aura obligatoirement une partie réelle et une partie imaginaire. On pourra l'écrire sous la forme

$$f(z) = u(x, y) + iv(x, y), \quad (1.51)$$

où $u(x, y)$ est la partie réelle et $v(x, y)$, la partie imaginaire de $f(z)$. Les fonctions $u(x, y)$ et $v(x, y)$ sont réelles et univaleuées. Dans le cas d'une fonction multiforme avec points de branchement, $f(z)$ est définie à l'intérieur d'une branche où la fonction f et donc u et v sont univaleuées.

5. On peut comprendre l'origine de l'infinité de feuillets en considérant le logarithme de base e comme la limite d'une puissance infinitésimale,

$$\ln z = \lim_{N \rightarrow \infty} N(z^{1/N} - 1),$$

qui contient $\sqrt[N]{z}$.

Exemple 1.3 :

Déterminons les fonctions $u(x, y)$ et $v(x, y)$ pour $f(z) = \sinh 2z$. En utilisant la définition de la fonction hyperbolique (1.35) et la formule d'Euler, nous avons

$$\begin{aligned} \sinh 2z &= \frac{e^{2x} e^{2iy} - e^{-2x} e^{-2iy}}{2} \\ &= \frac{e^{2x} (\cos 2y + i \sin 2y) - e^{-2x} (\cos 2y - i \sin 2y)}{2} \\ &= \frac{1}{2} \cos 2y (e^{2x} - e^{-2x}) + \frac{i}{2} \sin 2y (e^{2x} + e^{-2x}) \\ &= \sinh 2x \cos 2y + i \cosh 2x \sin 2y, \end{aligned} \tag{1.52}$$

d'où l'on tire

$$u(x, y) = \sinh 2x \cos 2y$$

et

$$v(x, y) = \cosh 2x \sin 2y.$$

Dérivation La dérivée d'une fonction $f(z)$ dans le plan complexe est définie par

$$\begin{aligned} \lim_{\delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \delta z) - f(z)}{\delta z} &= \left. \frac{\delta f}{\delta z} \right|_{\delta z \rightarrow 0}, \\ &\equiv \frac{df}{dz}. \end{aligned} \tag{1.53}$$

qui est analogue à la définition dans \mathbb{R} . Si on prend par exemple $f(z) = z^n$, on trouve selon cette définition

$$\begin{aligned} \left. \frac{\delta f}{\delta z} \right|_{\delta z \rightarrow 0} &= \left. \frac{z^n (1 + \delta z/z)^n - z^n}{\delta z} \right|_{\delta z \rightarrow 0}, \\ &= \left. \frac{z^n (1 + n\delta z/z + n(n-1)(\delta z)^2/(2z^2) + \dots) - z^n}{\delta z} \right|_{\delta z \rightarrow 0}, \\ &= \left. \frac{1}{2} n(n-1) z^{n-2} \delta z \right|_{\delta z \rightarrow 0} + n z^{n-1} = n z^{n-1}. \end{aligned} \tag{1.54}$$

qui est unique et bien définie. Il est important de noter ici que puisque $\delta z \rightarrow 0$ est arbitraire, le résultat de la dérivée est indépendant de l'approche de δz au point z dans le plan complexe (voir aussi plus loin).

Exemple 1.4 :

On peut alors dériver toutes les séries de puissance des fonctions élémentaires terme à terme, ce qui permet d'établir par exemple :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} e^z &= \frac{d}{dz} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \end{aligned}$$

$$= e^z; \tag{1.55}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \cos z &= \frac{d}{dz} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{z^{2n}}{(2n)!} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{z^{2n-1}}{(2n-1)!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{z^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= -\sin z. \end{aligned} \tag{1.56}$$

On vérifie également

$$\frac{d}{dz} \sin z = \cos z \tag{1.57}$$

$$\frac{d}{dz} \tan z = \frac{1}{\cos^2 z}, \text{ etc.} \tag{1.58}$$

On retrouve donc les mêmes résultats que pour la dérivation d'une variable réelle. Cela vaut également pour les fonctions hyperboliques où, par exemple

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \cosh z &= \frac{d}{dz} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{2n}}{(2n)!}, \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{2n-1}}{(2n-1)!}, \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{2n+1}}{(2n+1)!}, \\ &= \sinh z, \end{aligned} \tag{1.59}$$

$$\frac{d}{dz} \sinh z = \cosh z, \tag{1.60}$$

$$\frac{d}{dz} \tanh z = \frac{1}{\cosh^2 z}, \text{ etc.} \tag{1.61}$$

Tous les résultats connus pour la dérivation de fonctions élémentaires s'appliquent donc pour la variable complexe z . Il est à noter que pour la dérivation d'une fonction multiforme, comme par exemple

$$\frac{d}{dz} (z-c)^a = a(z-c)^{a-1}, \tag{1.62}$$

où $|a| < 1$ et $c \in \mathbb{C}$, la branche choisie doit être la même de part et d'autre de l'équation.

Fonctions analytiques Si la dérivée d'une fonction $f(z)$ existe pour tout z , élément d'un ouvert \mathcal{R} du plan complexe, la fonction est dite *analytique*⁶ dans \mathcal{R} . Une fonction $f(z)$ est analytique en un point z_0 s'il existe un voisinage $|z - z_0| < \delta$ en tout point duquel $f'(z)$ existe.

On rencontre fréquemment la situation où la fonction $f(z)$ est analytique partout dans un ouvert \mathcal{R} , sauf en une série de points $\{z_0\}$. On appellera ces points, les *singularités* de la fonction dans \mathcal{R} .

Conditions de Cauchy-Riemann Si $f(z)$ est analytique en z de l'ouvert \mathcal{R} , alors les conditions suivantes sur u et v sont *nécessairement* satisfaites

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \tag{1.63}$$

6. Dans la terminologie des fonctions complexes, une fonction analytique est aussi appelée fonction *régulière* ou encore *holomorphe*.

Ces conditions sont appelées *conditions Cauchy-Riemann*. Ces équations découlent du fait que si la dérivée existe en z , elle est indépendante de l'approche à ce point. Ainsi selon la définition de la dérivée (1.53), pour deux approches au point z , soit (i) : $\delta x \rightarrow 0$ ($\delta y = 0$) et (ii) : $\delta y \rightarrow 0$ ($\delta x = 0$), nous aurons :

$$\frac{\delta f}{\delta z} \Big|_{\delta z \rightarrow 0} = \frac{\delta u + i\delta v}{\delta x + i\delta y} \Big|_{\delta z \rightarrow 0} = \begin{cases} (i) : \lim_{\delta x \rightarrow 0} (\delta u/\delta x + i\delta v/\delta x) & = \frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x}, \\ (ii) : \lim_{\delta y \rightarrow 0} (-i\delta u/\delta y + \delta v/\delta y) & = -i\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y}. \end{cases} \quad (1.64)$$

Si la dérivée est indépendante de l'approche à z , les expressions obtenues pour (i) et (ii) doivent être identiques. L'égalité des parties réelle et imaginaire conduit immédiatement aux conditions Cauchy-Riemann (1.63). Dans le plan complexe, l'existence de la dérivée de $f(z)$ ne se réduit donc pas uniquement à la continuité de u et v et à l'existence de leurs dérivées, mais est aussi liée aux conditions supplémentaires (1.63).

Maintenant pour faire des relations Cauchy-Riemann une condition *suffisante* à l'analyticité de $f(z)$, il nous faut démontrer la proposition inverse à savoir : si les fonctions u et v de $f(z)$ satisfont les conditions Cauchy-Riemann et que leurs dérivées sont continues, alors $f(z)$ est analytique.

Si $\partial u/\partial x$ et $\partial u/\partial y$ sont continues par hypothèse, nous aurons :

$$\begin{aligned} \Delta u &= u(x + \Delta x, y + \Delta y) - u(x, y) \\ &\rightarrow \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Delta x + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)\Delta y \quad (\text{si } \Delta x, \Delta y \rightarrow 0) \end{aligned} \quad (1.65)$$

De même si $\partial v/\partial x$ et $\partial v/\partial y$ sont supposées continues, nous aurons :

$$\begin{aligned} \Delta v &= v(x + \Delta x, y + \Delta y) - v(x, y) \\ &\rightarrow \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)\Delta x + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)\Delta y \quad (\text{si } \Delta x, \Delta y \rightarrow 0) \end{aligned} \quad (1.66)$$

En combinant ces expressions pour former $\Delta f = \Delta u + i\Delta v$ dans les limites $\Delta x, \Delta y \rightarrow 0$, nous aurons via l'utilisation des relations Cauchy-Riemann :

$$\begin{aligned} \Delta f &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x}\right)\Delta x + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + i\frac{\partial v}{\partial y}\right)\Delta y \\ &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x}\right)\Delta x + \left(-\frac{\partial v}{\partial x} + i\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Delta y \\ &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x}\right)(\Delta x + i\Delta y), \end{aligned} \quad (1.67)$$

ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \frac{\Delta f}{\Delta z} &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x}\right) \\ &\rightarrow f'(z), \end{aligned} \quad (1.68)$$

et donc à l'existence de la dérivée de $f(z)$, compte tenu de la continuité de u et v . Il s'ensuit que *les conditions de Cauchy-Riemann, assorties des conditions de continuité sur u et v , sont nécessaires et suffisantes pour l'analyticité de $f(z)$.*

Fonctions harmoniques Si une fonction $f = u + iv$ satisfait les conditions Cauchy-Riemann et que les dérivées secondes de u et v existent et sont continues, on peut écrire

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y},$$

1.2. Dérivation, fonctions analytiques et conditions Cauchy-Reimann

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial x}. \quad (1.69)$$

De même,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y}, \\ \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} &= -\frac{\partial^2 v}{\partial y \partial x}. \end{aligned} \quad (1.70)$$

Compte tenu des propriétés liées à u et v , on peut intervertir l'ordre des dérivées dans les termes de droite et obtenir

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \equiv \nabla^2 u = 0, \quad (1.71)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \equiv \nabla^2 v = 0. \quad (1.72)$$

Ainsi, pour une fonction f analytique, u et v satisfont à l'équation de Laplace à deux dimensions. On appelle de telles fonctions u et v , des *fonctions harmoniques*. C'est ainsi que les fonctions analytiques possèdent de nombreuses applications physiques dans la théorie du potentiel à deux dimensions.

Exemple 1.5 :

On cherche à déterminer si la fonction $f(z) = (x^2 - y^2) + 2ixy$ est analytique. Comme $u(x, y) = x^2 - y^2$ et $v(x, y) = 2xy$, on trouve $\partial u / \partial x = 2x = \partial v / \partial y = 2x$, et $\partial u / \partial y = -2y = -\partial v / \partial x$, ce qui satisfait aux conditions Cauchy-Reimann et f est donc analytique.

Exemple 1.6 :

La fonction $f(z) = 2y + ix$ n'est pas analytique. En effet, bien que $\partial u / \partial x = \partial v / \partial y = 0$, $\partial u / \partial y = 2 \neq -\partial v / \partial x = -1$.

Exemple 1.7 :

Soit la fonction $u(x, y) = 3x^2y - y^3$. Il est aisé de montrer que cette fonction est harmonique :

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \\ &= 6y - 6y = 0. \end{aligned} \quad (1.73)$$

On peut trouver une fonction $v(x, y)$ telle que $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ soit analytique. Pour y parvenir, on utilise une des conditions Cauchy-Reimann reliant u à v ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial y} &= \frac{\partial u}{\partial x}, \\ &= 6xy, \\ v(x, y) &= \int 6xy \, dy, \\ &= 3xy^2 + C(x), \end{aligned} \quad (1.74)$$

où $C(x)$ est une ‘constante’ d’intégration, qui peut admettre une dépendance en x . Afin de déterminer $C(x)$ à une constante numérique près, on utilise l’autre condition Cauchy-Reimann pour obtenir

$$\begin{aligned}\frac{\partial v}{\partial x} &= -\frac{\partial u}{\partial y}, \\ &= 3y^2 + C'(x), \\ &= 3y^2 - 3x^2,\end{aligned}\tag{1.75}$$

ce qui à son tour implique

$$\begin{aligned}C'(x) &= -3x^2, \\ C(x) &= -x^3 + c,\end{aligned}\tag{1.76}$$

où c est une constante – réelle – d’intégration. On a alors selon (1.75),

$$v(x, y) = 3xy^2 - x^3 + c,$$

ce qui donne en définitive

$$f(z) = 3x^2y - y^3 + i(3xy^2 - x^3) + ic,\tag{1.77}$$

qui est analytique.

On peut montrer que pour une fonction $f(re^{i\theta}) = R(r, \theta)e^{i\Phi(r, \theta)}$ exprimée en coordonnées polaires où $R(r, \theta)$ et $\Phi(r, \theta)$ sont des fonctions réelles de r et θ , les conditions Cauchy-reimann s’écrivent

$$\frac{\partial R}{\partial r} = \frac{R}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta},\tag{1.78}$$

$$R \frac{\partial \Phi}{\partial r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial \theta}.\tag{1.79}$$

Gradient, divergence, rotationnel et laplacien

Gradient Le gradient d’une fonction f est défini par

$$\nabla f \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) f,\tag{1.80}$$

$$= \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} + i \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)\tag{1.81}$$

$$= 2 \frac{\partial B}{\partial z^*},\tag{1.82}$$

où $B(z, z^*) = f(x, y)$ ⁷. On notera que pour une fonction analytique satisfaisant les conditions Cauchy-Reimann, son gradient est nul et donc B est indépendant de z^* .

On définit de manière analogue l’opération gradient conjugué

$$\bar{\nabla} f \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) f,\tag{1.83}$$

$$= \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\tag{1.84}$$

$$= 2 \frac{\partial B}{\partial z},\tag{1.85}$$

7. On utilise ici les relations facilement démontrables $\partial/\partial x = \partial/\partial z + \partial/\partial z^*$ et $\partial/\partial y = i(\partial/\partial z - \partial/\partial z^*)$.

Divergence La divergence d'une fonction complexe f est définie par analogie à celle des vecteurs,

$$\nabla \cdot f \equiv \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (1.86)$$

$$= 2\operatorname{Re} \left\{ \frac{\partial B}{\partial z} \right\}, \quad (1.87)$$

qui est réelle.

Rotationnel Le rotationnel d'une fonction complexe est également défini de manière analogue aux vecteurs. Ainsi

$$\nabla \times f \equiv \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \quad (1.88)$$

$$= \operatorname{Im} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) (u + iv) \right\}, \quad (1.89)$$

$$= 2\operatorname{Im} \left\{ \frac{\partial B}{\partial z} \right\}. \quad (1.90)$$

Laplacien Le laplacien est défini comme le produit scalaire du gradient avec lui-même :

$$(\nabla \cdot \nabla)f \equiv \nabla^2 f, \quad (1.91)$$

$$\equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f, \quad (1.92)$$

$$= \operatorname{Re} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\} f, \quad (1.93)$$

$$= \operatorname{Re} \{ \nabla \bar{\nabla} \} f, \quad (1.94)$$

$$= 4 \frac{\partial^2 B}{\partial z \partial z^*}. \quad (1.95)$$

On remarque que si f est analytique, son laplacien est nul et donc u et v sont harmoniques.

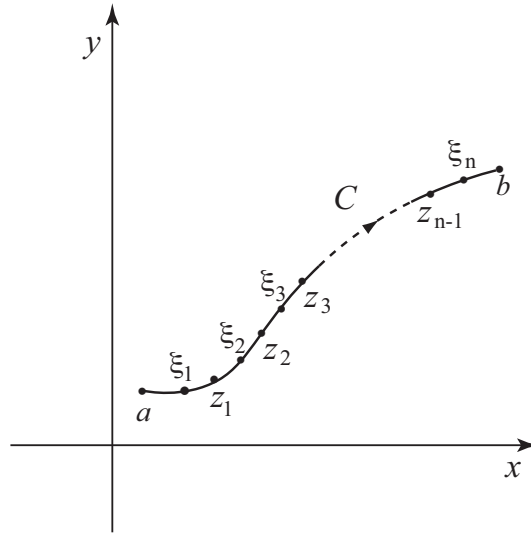


FIGURE 1.5
Parcours d'intégration dans le plan complexe.

1.3 Intégration dans le plan complexe

1.3.1 Intégration curviligne

On procède maintenant à l'introduction d'une intégrale curviligne le long d'un parcours C dans le plan complexe. Soit une fonction $f(z)$ qui est continue sur C allant du point a au point b (Fig. 1.5). On sépare le parcours C en n intervalles, avec $\xi_{1\dots n}$, situé à l'intérieur de l'intervalle $1, \dots, n$ et on introduit la somme de Riemann

$$S_n = \sum_{j=1}^n f(\xi_j) \delta z_j, \quad (1.96)$$

où $\delta z_j = z_j - z_{j-1}$. En faisant tendre la longueur de l'intervalle $|\delta z_j| \rightarrow 0$, la somme $S_{n \rightarrow \infty}$ pour une partition tendant vers l'infini définit l'intégrale curviligne complexe

$$S_{n \rightarrow \infty} \equiv \int_C f(z) dz, \quad (1.97)$$

qui est l'intégrale de $f(z)$ de a à b le long de C .

Si maintenant $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ et $dz = dx + idy$, on peut décomposer l'intégrale curviligne en ses parties réelle et imaginaire,

$$\int_C f(z) dz = \int_C [u(x, y) dx - v(x, y) dy] + i \int_C [v(x, y) dx + u(x, y) dy], \quad (1.98)$$

où chaque intégrale à la droite de la précédente égalité est réelle.

On peut également donner une représentation paramétrique de l'intégrale curviligne. En fonction du paramètre t générant le parcours C sur l'intervalle $[t_1, t_2]$, avec $z(t) = (x(t), y(t))$ supposée différentiable, on peut écrire

$$\int_C f(z) dz = \int_{t_1}^{t_2} f(z(t)) \dot{z}(t) dt, \quad (1.99)$$

où $\dot{z}(t) = dz/dt$. Cette équation se sépare aussi sous la forme,

$$\begin{aligned} \int_C f(z)dz &= \int_{t_1}^{t_2} [u(x(t), y(t))\dot{x}(t) - v(x(t), y(t))\dot{y}(t)]dt \\ &+ i \int_{t_1}^{t_2} [v(x(t), y(t))\dot{x}(t) + u(x(t), y(t))\dot{y}(t)]dt, \end{aligned} \quad (1.100)$$

où $x(t_1) + iy(t_1) = a$ et $x(t_2) + iy(t_2) = b$.

1.3.2 Propriétés des intégrales

Intégrale indéfinie Si $f(z)$ et $F(z)$ sont des fonctions analytiques et que $F'(z) = f(z)$, alors on peut écrire

$$F(z) = \int f(z)dz + c \quad (1.101)$$

en tant qu'intégrale indéfinie avec c comme constante d'intégration.

Intégration par partie Considérons le produit de fonctions analytiques $U(z)V(z)$. Sa différentielle totale s'écrit

$$d[U(z)V(z)] = U(z)V'(z)dz + U'(z)V(z)dz.$$

L'intégration de part et d'autre permet d'établir

$$\int U(z)V'(z)dz = U(z)V(z) - \int U'(z)V(z)dz \quad (1.102)$$

qui est l'analogue complexe de la formule d'intégration par parties dans \mathbb{R} .

Si $f(z)$ et $g(z)$ sont des fonctions intégrables, on a les relations suivantes découlant de l'intégration en tant qu'application linéaire :

$$\int_C [f(z) + g(z)]dz = \int_C f(z)dz + \int_C g(z)dz, \quad (1.103)$$

$$\int_C Af(z)dz = A \int_C f(z)dz, \quad (1.104)$$

$$\int_a^b f(z)dz = - \int_b^a f(z)dz, \quad (1.105)$$

$$\oint_C f(z)dz = - \oint_C f(z)dz. \quad (1.106)$$

On notera le sens opposé de l'intégration de cette dernière intégrale.

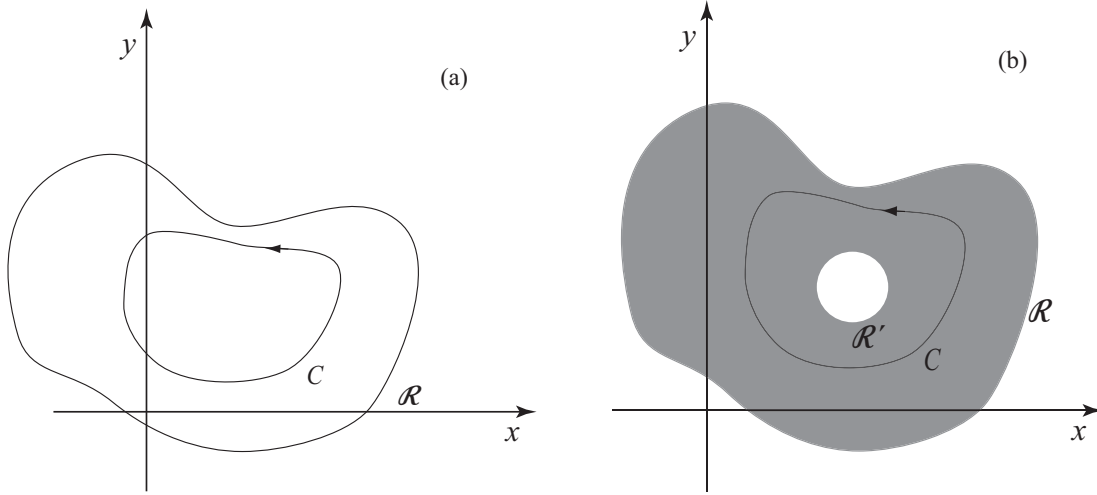


FIGURE 1.6
Domaines \mathcal{R} connexe (a) et multi-connexe (b) dans le plan complexe.

1.3.3 Théorème de Cauchy

Dans un premier temps, on définit un ouvert \mathcal{R} **simplement connexe** du plan complexe (Fig. 1.6-a) si toute courbe fermée simple à l'intérieur de \mathcal{R} (i.e., que tous les points de la courbe appartiennent à \mathcal{R}) peut se réduire par contraction à un seul point élément de \mathcal{R} . Lorsqu'au contraire, par contraction la courbe est irréductible à un seul point comme à la figure 1.6-b, \mathcal{R} est alors **multi-connexe**.

Théorème de Cauchy : Si $f(z)$ est une fonction analytique dans un domaine \mathcal{R} simplement connexe avec $f'(z)$ supposée continue, alors nous avons pour tout parcours C fermé,

$$\oint_C f(z)dz = 0. \quad (1.107)$$

La démonstration du théorème de Cauchy s'effectue à l'aide du théorème de Stokes. Si $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, la décomposition de l'intégrale suivant l'égalité (1.98) permet d'écrire

$$\oint_C f(z)dz = \underbrace{\oint_C (udx - vdy)}_{I_1} + i \underbrace{\oint_C (vdx + udy)}_{I_2}, \quad (1.108)$$

Chaque intégrale réelle I_1 et I_2 peut être réécrite sous forme d'une intégrale curviligne dans \mathbb{R}^2 , à savoir

$$I_{1,2} = \oint_C \vec{V}_{1,2} \cdot d\vec{l}, \quad (1.109)$$

où $\vec{V}_1 = u\hat{x} - v\hat{y}$ et $\vec{V}_2 = v\hat{x} + u\hat{y}$ et $d\vec{l} = dx\hat{x} + dy\hat{y}$. Selon le théorème de Stokes

$$\oint_C \vec{V}_{1,2} \cdot d\vec{l} = \int_S (\nabla \times \vec{V}_{1,2}) \cdot d\vec{S}, \quad (1.110)$$

où S est la surface délimitée par C , avec $d\vec{S} = dxdy\hat{z}$ et où

$$\nabla \times \vec{V}_{1,2} = (\partial_x V_{y,1,2} - \partial_y V_{x,1,2})\hat{z}. \quad (1.111)$$

Grâce à l'analyticité de $f(z)$, les conditions Cauchy-Reimann (1.63), donnent à la fois pour I_1 et I_2 , $\partial_y V_{x,1,2} = \partial_x V_{y,1,2}$. On conclut alors que $I_1 = I_2 = 0$, ce qui démontre le théorème de Cauchy.

La réciproque du théorème de Cauchy est connue sous le nom de théorème de Morera. Nous en donnons ici l'énoncé sans démonstration :

Théorème de Morera : Si pour une fonction $f(z)$ continue dans un domaine \mathcal{R} simplement connexe, nous pouvons écrire

$$\oint_C f(z)dz = 0, \quad (1.112)$$

alors $f(z)$ est analytique dans \mathcal{R} .

Une conséquence importante du théorème de Cauchy est l'invariance de l'intégrale $\int_{z_1}^{z_2} f(z)dz$ par rapport au chemin reliant z_1 et z_2 dans \mathcal{R} , si $f(z)$ est analytique. On le vérifie aisément en considérant le parcours total $C_1 + C_2$ de la Fig. 1.7. Selon le théorème de Cauchy, nous pouvons écrire

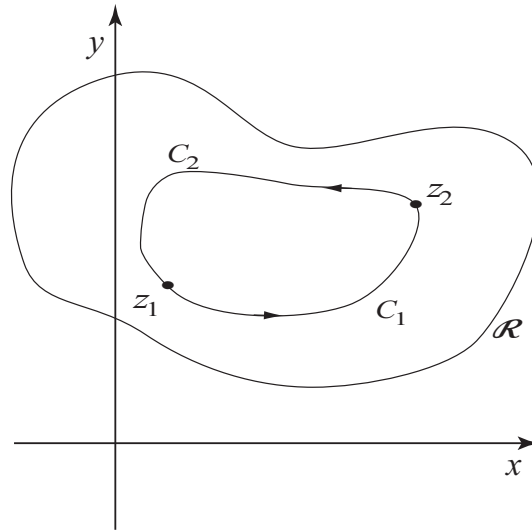


FIGURE 1.7

$$\begin{aligned} \oint_{C_1+C_2} f(z)dz &= 0, \\ \int_{C_1} f(z)dz + \int_{C_2} f(z)dz &= 0, \\ \int_{C_1} f(z)dz &= - \int_{C_2} f(z)dz = \int_{C'_2} f(z)dz, \end{aligned} \quad (1.113)$$

où le chemin C'_2 va de z_1 à z_2 , ce qui établit le résultat. L'indépendance de la valeur de l'intégrale par rapport au parcours utilisé entre z_1 et z_2 dans le plan complexe peut aussi s'interpréter comme l'invariance de l'intégrale par rapport à toute déformation du parcours reliant les deux points.

Finalement, si l'intégrale est indépendante du chemin dans le plan complexe, on peut démontrer que la fonction analytique $f(z) = u + iv$ dérive d'un potentiel complexe $F(z)$ pour lequel on pourra écrire⁸

$$\int_{z_1}^{z_2} f(z)dz = F(z_2) - F(z_1). \quad (1.114)$$

où le potentiel $F(z)$ est en fait la primitive de $f(z)$. Considérons maintenant le parcours de la Fig. 1.8 dans

8. L'analogie dans \mathbb{R}^n d'un tel théorème est bien connu pour les fonctions potentielles réelles.

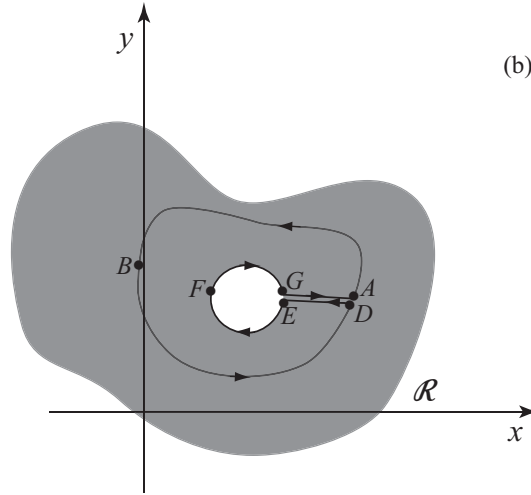


FIGURE 1.8

Intégration pour un parcours fermé dans un domaine multiconnexe (la région pâle n'est pas une zone d'analyticité de la fonction). Dans la région ombragée, qui est analytique, le parcours d'intégration peut être déformé sans changer la valeur de l'intégrale.

une région multi-connexe. Selon le théorème de Cauchy, si $f(z)$ est analytique dans toute la région ombragée, nous pouvons écrire pour le parcours fermé total

$$\int_{ABD} f(z)dz + \int_{EFG} f(z)dz + \int_{GA} f(z)dz + \int_{DE} f(z)dz = \oint f(z)dz = 0. \quad (1.115)$$

On constate que sur \overline{GA} et \overline{DE} où $f(z)$ est analytique, on a selon (1.114) $\int_{GA} f(z)dz = F(z_A) - F(z_G)$ et $\int_{DE} f(z)dz = F(z_D) - F(z_E)$. Dans la limite où \overline{GA} est infiniment près de \overline{DE} , on a évidemment $\int_{GA} f(z)dz = -\int_{DE} f(z)dz$, et donc ces deux contributions s'annulent mutuellement. On a alors dans cette limite

$$\begin{aligned} \oint_C f(z)dz &= -\oint_{-C'} f(z)dz \\ &= \oint_{C'} f(z)dz, \end{aligned} \quad (1.116)$$

où les parcours fermés antihoraires C et C' correspondent respectivement à \overline{ABD} et \overline{GFE} . Ce résultat montre que dans toute la région où $f(z)$ est analytique, le parcours fermé d'intégration C peut être déformé vers C' sans changer la valeur de l'intégrale. Cette propriété peut s'avérer fort utile dans une grande variété de situations.

1.3.4 Formule intégrale de Cauchy

On considère une fonction $f(z)$ analytique à l'intérieur et sur le parcours C . Soit z_0 un point intérieur à C (parcours similaire à la Fig. 1.11), alors

$$f(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz, \quad (1.117)$$

qui est connue sous le nom de *formule intégrale de Cauchy*. Elle se démontre aisément en prenant en compte que l'intégrande est analytique sur toute la région intérieure à C , sauf évidemment en z_0 où il y a divergence.

Une déformation du contour est alors possible de $C \rightarrow C'$ où C' est un cercle de rayon infinitésimal autour de z_0 . En posant sur ce dernier : $z - z_0 = \rho e^{i\theta}$ avec $\rho \rightarrow 0$, nous avons sur C' :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} \frac{f(z)}{z - z_0} dz \\ &= \frac{1}{2\pi} \lim_{\rho \rightarrow 0} \int_0^{2\pi} f(z_0 + \rho e^{i\theta}) d\theta \\ &= f(z_0), \end{aligned} \tag{1.118}$$

ce qui démontre le résultat recherché. La formule intégrale de Cauchy se généralise aux dérivées successives en z_0 , soit

$$f^{(n)}(z_0) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz. \tag{1.119}$$

On peut s'en convaincre en procédant par induction. En effet, si on suppose que ce résultat est vrai pour n , nous aurons pour $n + 1$:

$$\begin{aligned} \frac{(n+1)!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+2}} dz &= (n+1) \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+2}} dz \\ &= -\frac{n!}{2\pi i} \oint_C f(z) d[(z - z_0)^{-n-1}] \\ &= \frac{n!}{2\pi i} \left[-\frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} \Big|_C + \oint_C \frac{f^{(1)}(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz \right] \\ &= f^{(n+1)}(z_0), \end{aligned} \tag{1.120}$$

où l'avant dernière ligne découle d'une intégration par partie sur C [c.f. (1.102)], et pour laquelle le premier terme est identiquement nul sur un parcours C fermé, alors que le second est évalué avec l'hypothèse de départ. Cette généralisation montre que si $f(z)$ est analytique, à savoir que sa première dérivée existe en z , alors toutes les dérivées successives existent également. Ce résultat n'a pas d'équivalent dans les réels.

Exemple 1.8 :

Évaluons

$$I = \oint_C \frac{e^{2z}}{(z+1)^4} dz \quad C : |z| = 3. \tag{1.121}$$

D'après la forme de l'intégrande, le terme exponentiel noté $f(z) = e^{2z}$ au numérateur a un rayon de convergence infini et est évidemment analytique à l'intérieur et sur le parcours C . Cependant, le dénominateur passe par zéro en $z_0 = -1$ et l'intégrande possède donc une singularité d'ordre quatre dans C .

L'intégrale peut s'écrire sous la forme générique (1.119) pour obtenir le résultat,

$$I = \oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^4} dz = \frac{2\pi i}{3!} f^{(3)}(-1) = \frac{8}{3} \pi i e^{-2}. \tag{1.122}$$

1.3.5 Séries de Taylor et de Laurent

Série de Taylor

On peut utiliser la formule intégrale de Cauchy pour construire un développement en série de Taylor d'une fonction $f(z)$ autour de z_0 . Si $f(z)$ est analytique autour de z_0 et ce, jusqu'à une distance $|z_1 - z_0|$ où z_1 est le

premier point singulier rencontré, alors $f(z)$ admet un développement en série de la forme

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z - z_0)^n, \quad (1.123)$$

pour $|z - z_0| < R$, où $R = |z_1 - z_0|$ est appelé *rayon de convergence* de la fonction [cf. (1.41)]. On arrive à un tel développement grâce à la formule intégrale de Cauchy pour $f(z)$:

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{z' - z} dz'.$$

où C est le parcours donné à la fig. 1.9, lequel est intérieur au rayon de convergence. Pour tout z de ce domaine,

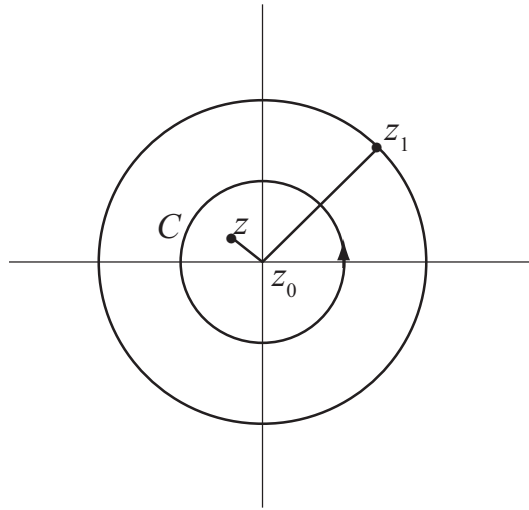


FIGURE 1.9

nous avons $|z - z_0| < |z' - z_0|$, où z' est sur C , ce qui permet d'écrire suivant l'utilisation de la série géométrique (1.47) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{z' - z} &= \frac{1}{(z' - z_0)} \left(1 - \frac{z - z_0}{z' - z_0} \right)^{-1} \\ &= \frac{1}{(z' - z_0)} \left(1 + \frac{z - z_0}{z' - z_0} + \frac{(z - z_0)^2}{(z' - z_0)^2} + \dots \right), \quad |z - z_0| < |z' - z_0| \\ &= \frac{1}{(z' - z_0)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z - z_0}{z' - z_0} \right)^n. \end{aligned} \quad (1.124)$$

En substituant cette expression dans (1.119), on trouve

$$\begin{aligned} f(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{n+1}} dz' \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n \frac{1}{n!} f^{(n)}(z_0), \end{aligned} \quad (1.125)$$

ce qui correspond au *développement de Taylor* pour $|z - z_0| < R$. Ainsi ce développement existe dans le disque de convergence si l'ensemble des $f^{(n)}(z_0)$ existe, ce qui correspond à la condition d'analyticité de $f(z)$ à l'intérieur du disque.

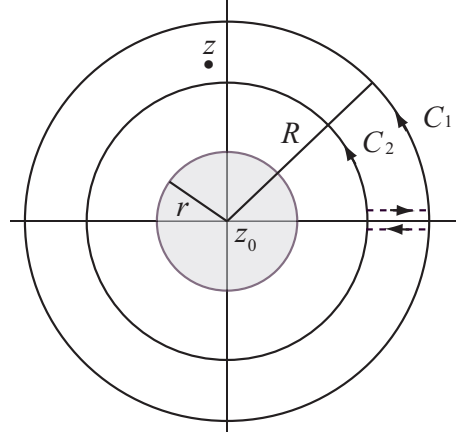


FIGURE 1.10

Série de Laurent

On peut maintenant introduire le *théorème de Laurent* qui élargit le concept de développement en série d'une fonction avec cette fois la présence de singularités sous forme de pôles (voir plus bas, la classification des singularités d'une fonction). Soit $f(z)$ une fonction analytique dans un anneau circulaire de rayon intérieur r et extérieur R (fig. 1.10), alors $f(z)$ admettra un développement en série de la forme

$$\begin{aligned} f(z) &= \dots + \frac{a_{-n}}{(z-z_0)^n} + \dots + \frac{a_{-2}}{(z-z_0)^2} + \frac{a_{-1}}{z-z_0} + a_0 + a_1(z-z_0) + \dots \\ &= \sum_{n=-1}^{\infty} a_n(z-z_0)^n + \sum_{n=0}^{\infty} a_n(z-z_0)^n, \end{aligned} \quad (1.126)$$

appelée *série de Laurent*, pour $r < |z-z_0| < R$. La partie correspondant aux puissances négatives est appelée *partie principale* de la série alors que celle avec puissances $n \geq 0$ est appelée *partie régulière*.

On démontre le théorème en considérant une intégration le long des deux parcours C_1 et $-C_2$ dans \mathcal{R} , où z un point dans l'anneau comme à la fig. 1.10. Si on adjoint à C_1 et $-C_2$ les deux parties de parcours hachuré, la valeur de l'intégration ne change pas puisque lorsqu'infiniment proches ces deux parties donneront au total une contribution nulle dans la région d'analyticité. Nous obtenons donc au total un parcours fermé incluant z (fig. 1.10). Par la formule intégrale de Cauchy, on peut alors écrire

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_1} \frac{f(z')}{z'-z} dz' + \frac{1}{2\pi i} \oint_{-C_2} \frac{f(z')}{z'-z} dz' + 0 \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_1} \frac{f(z')}{z'-z} dz' - \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_2} \frac{f(z')}{z'-z} dz' \end{aligned} \quad (1.127)$$

Sur C_1 pour la première intégrale, nous avons

$$\begin{aligned} \frac{1}{z'-z} &= \frac{1}{z'-z_0 \left(1 - \frac{z-z_0}{z'-z_0}\right)} \\ &= \frac{1}{z'-z_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z-z_0}{z'-z_0}\right)^n, \quad |z-z_0| < |z'-z_0| \quad (C_1), \end{aligned} \quad (1.128)$$

ce qui donne

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{C_1} \frac{f(z')}{z'-z} dz' = \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=0}^{\infty} (z-z_0)^n \oint_{C_1} \frac{f(z')}{(z'-z_0)^{n+1}} dz'$$

$$\equiv \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z - z_0)^n, \quad (1.129)$$

correspondant à la partie régulière de la série (1.126). Maintenant pour la deuxième intégrale, on peut écrire

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\pi i} \oint_{C_2} \frac{f(z')}{z' - z} dz' &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_2} \frac{f(z)}{(z - z_0) \left(1 - \frac{z' - z_0}{z - z_0}\right)} dz' \\ &= \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=0}^{\infty} \oint_{C_2} \frac{f(z)}{(z - z_0)} \left(\frac{z' - z_0}{z - z_0}\right)^n dz', \quad |z' - z_0| < |z - z_0| \quad (C_2). \end{aligned} \quad (1.130)$$

En posant successivement $n + 1 \rightarrow n$ et $n \rightarrow -n$, nous avons

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\pi i} \oint_{C_2} \frac{f(z')}{z' - z} dz' &= \sum_{n=-1}^{-\infty} (z - z_0)^n \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_2} \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{n+1}} dz' \\ &\equiv \sum_{n=-1}^{-\infty} a_n (z - z_0)^n, \end{aligned} \quad (1.131)$$

correspondant à la partie principale de la série (1.126). La combinaison des deux intégrales donnera la série

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - z_0)^n \quad (1.132)$$

où

$$a_n = \oint_{C_i} \frac{f(z')}{(z' - z_0)^{n+1}} dz' \begin{cases} C_1, & n \geq 0, \\ C_2, & n \leq -1, \end{cases} \quad (1.133)$$

ce qui complète la démonstration du théorème de Laurent.

La partie régulière, qui est de la forme d'une série de Taylor, converge pour $|z - z_0| < R$, alors que la partie principale avec puissances négatives est convergente pour $1/|z - z_0| < \text{constante}$, soit pour $|z - z_0| > r$ à l'extérieur du cercle de rayon r . La région $r < |z - z_0| < R$ définit alors l'anneau de convergence de la série de Laurent.

Selon (1.131), le coefficient du terme à $n = -1$ de la partie principale de la série de Laurent s'écrit

$$a_{-1} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) dz, \quad (1.134)$$

Ce coefficient revêt une importance particulière et est appelé le *résidu* de la fonction en z_0 , lequel sera aussi noté $R(z_0)$.

Exemple 1.9 :

Soit la fonction $f(z) = e^z/z^3$. La série de Laurent autour de $z = 0$ s'obtient par un simple développement en puissance de z , à savoir

$$f(z) = \frac{e^z}{z^3}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{z^3} \left(1 + z + \frac{z^2}{2!} + \frac{z^3}{3!} + \dots \right) \\
&= \frac{1}{z^3} + \frac{1}{z^2} + \frac{1}{2!z} + \frac{1}{3!} + \frac{z}{4!} + \dots,
\end{aligned} \tag{1.135}$$

Le résidu de la fonction en $z = 0$ est donné par $R(0) = \frac{1}{2}$. L'anneau de convergence est donné par $\infty > |z| > 0$. On remarque que les quelques termes de la partie principale déterminent le rayon r inférieur, mais n'influencent aucunement le rayon de convergence R .

Exemple 1.10 :

Soit la fonction

$$f(z) = \frac{1}{(z+1)(z+3)}. \tag{1.136}$$

Pour obtenir la série de Laurent et les anneaux de convergence centrés en $z = 0$, il est utile de décomposer la fonction en fractions partielles

$$\frac{1}{(z+1)(z+3)} = \frac{1}{2} \frac{1}{z+1} - \frac{1}{2} \frac{1}{z+3} \tag{1.137}$$

et développer chaque terme à l'aide de la progression géométrique (1.47). Nous avons pour $|z| < 1$

$$\begin{aligned}
f(z) &= \frac{1}{2} \frac{1}{z+1} - \frac{1}{6(1+z/3)} \\
&= \frac{1}{3} - \frac{4}{9}z - \frac{13}{27}z^2 + \dots, \quad |z| < 1,
\end{aligned} \tag{1.138}$$

qui n'admet qu'une partie régulière. Maintenant pour le deuxième anneau de convergence, soit pour $3 > |z| > 1$, on utilise plutôt la forme équivalente :

$$\begin{aligned}
f(z) &= \frac{1}{2} \frac{1}{z(1+1/z)} - \frac{1}{6(1+z/3)} \\
&= \frac{1}{2z} \left(1 - \frac{1}{z} + \frac{1}{z^2} + \dots \right) - \frac{1}{6} \left(1 - \frac{z}{3} + \frac{z^2}{9} + \dots \right) \\
&= -\frac{1}{2z^3} - \frac{1}{2z^2} + \frac{1}{2z} - \frac{1}{6} + \frac{z}{18} - \frac{z^2}{54} + \dots \quad 3 > |z| > 1.
\end{aligned} \tag{1.139}$$

Finalement pour $|z| > 3$, on utilise

$$\begin{aligned}
f(z) &= \frac{1}{2} \frac{1}{z(1+1/z)} - \frac{1}{2} \frac{1}{z(1+3/z)} \\
&= \frac{1}{2} \frac{1}{z} \left(1 - \frac{1}{z} + \frac{1}{z^2} + \dots \right) - \frac{1}{2} \frac{1}{z} \left(1 - \frac{3}{z} + \frac{9}{z^2} - \frac{27}{z^3} + \dots \right) \\
&= \frac{1}{z^2} - \frac{4}{z^3} + \frac{13}{z^4} + \dots \quad |z| > 3.
\end{aligned} \tag{1.140}$$

À partir de la première expression valable pour $|z| < 1$, on tire la valeur du résidu à l'origine $R(0) = 0$ qui est nul puisqu'il n'existe pas de partie principale.

On notera que la série de Laurent pour un anneau de convergence donné est unique. En général, $f(z)$ peut avoir deux, voire plusieurs séries de Laurent distinctes comme dans l'exemple précédent. Les régions de convergence ne présentent cependant aucune intersection.

Classification des zéros et des singularités dans le plan complexe

Points réguliers et zéros. Si $f(z)$ est analytique en z , alors z est un *point régulier*. Un *zéro* d'une fonction $f(z)$ en $z = z_0$ est défini par $f(z_0) = 0$. Si $f(z)$ est analytique en $z = z_0$, elle admet un développement de Taylor de la forme (1.9). Ainsi si $a_0 = 0$ et $a_1 \neq 0$ le zéro est appelé *zéro simple*. Si par contre $a_0, a_1, \dots, a_{m-1} = 0$ et $a_m \neq 0$, le

zéro est d'ordre m .

Singularités isolées. Si $f(z)$ est analytique au voisinage d'un point $z = z_0$ sauf en ce point, alors $f(z)$ possède une *singularité isolée* en z_0 et elle est appelée *fonction méromorphe*. On distingue deux types de singularités. Le premier est celui d'une *singularité apparente* comme c'est le cas par exemple de la fonction sinus cardinal :

$$f(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad (1.141)$$

en $z = 0$. On vérifie que la valeur de la fonction est finie en $z \rightarrow 0$. En effet

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\sin z}{z} &= \lim_{z \rightarrow 0} \frac{z - z^3/3! + \dots}{z} \\ &\rightarrow \frac{z}{z} = 1, \end{aligned}$$

et $z = 0$ est en fait un point régulier.

La fonction $f(z)$ a un *pôle* en $z = z_0$ si $|f(z \rightarrow z_0)| \rightarrow \infty$ et possède un développement de Laurent

$$\begin{aligned} f(z) &= \sum_{n=-m}^{\infty} a_n (z - z_0)^n \\ &= a_{-m} (z - z_0)^{-m} + a_{-m+1} (z - z_0)^{-m+1} + \dots \end{aligned} \quad (1.142)$$

Si $a_{-m} \neq 0$, la fonction a un pôle d'ordre m : $m = 1$ correspond à un pôle simple, $m = 2$, à un pôle double etc. Lorsque $m \rightarrow \infty$, la singularité en z_0 est dite *essentielle*. Par exemple, la fonction $e^{1/z}$ possède le développement suivant

$$e^{1/z} = 1 + \frac{1}{z} + \frac{1}{2z^2} + \dots + \frac{1}{n!z^n} + \dots \quad (1.143)$$

pour $|z| > 0$ et présente donc une singularité essentielle à l'origine.

Points de branchement. Un point de branchement d'une fonction multiforme est un point singulier. Chaque branche de la fonction est cependant analytique à distance finie de ce point. Une fonction avec un point de branchement n'admet pas de série de Laurent autour de ce point. Nous verrons dans le cadre des solutions des équations différentielles à points réguliers singuliers qu'elles peuvent admettre un autre type de développement, soit une série de Fröbenius.

Points à l'infini. La fonction $f(1/t)$ obtenue en posant $z = 1/t$ nous renseigne sur l'existence de singularités à l'infini. Ainsi, $f(z) = z^2$ devient $f(1/t) = t^{-2}$ qui possède un pôle double en $t = 0$; $f(z)$ possède donc un pôle double à l'infini.

1.3.6 Théorème des résidus

Soit une fonction $f(z)$ possédant une série de Laurent autour de z_0

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - z_0)^n. \quad (1.144)$$

L'intégration de $f(z)$ sur un parcours C entourant la singularité isolée en z_0 (fig. 1.11) donnera

$$\begin{aligned}
 \oint_C f(z)dz &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \oint_C (z-z_0)^n dz \\
 &= \sum_{n \neq -1} a_n \oint_C (z-z_0)^n dz + a_{-1} \oint_C \frac{dz}{z-z_0} dz \\
 &= \sum_{n \neq -1} a_n(n+1)(z-z_0)^{n+1} \Big|_C + ia_{-1} \int_0^{2\pi} d\theta \\
 &= 2\pi ia_{-1} = 2\pi iR(z_0),
 \end{aligned} \tag{1.145}$$

où l'intégrale pour $n \neq -1$ s'annule pour un parcours fermé, alors que la déformation de C vers un parcours circulaire donne pour la seconde $2\pi i$. Ce résultat lie l'intégrale de $f(z)$ sur C entourant z_0 au résidu en ce point, modulo la constante $2\pi i$. On utilisera fréquemment la notation $R(z_0)$ pour le résidu a_{-1} .

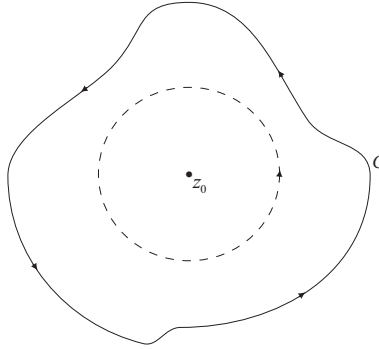


FIGURE 1.11

Parcours d'intégration entourant la singularité isolée z_0 et sa déformation vers un parcours circulaire.

Ce résultat remarquable se généralise aisément au cas où plusieurs singularités isolées de $f(z)$ sont intérieures au parcours d'intégration. En effet, considérons le parcours de la Fig. 1.12 qui est construit de manière à exclure toutes les singularités en z_0, z_1, \dots . Selon le théorème de Cauchy, on a que l'intégrale de $f(z)$ le long de tout parcours fermé où la fonction est analytique sera nulle. La décomposition sur l'ensemble des portions du parcours permet alors d'écrire

$$\begin{aligned}
 \oint_C f(z)dz &= -\oint_{C'_0} f(z)dz - \oint_{C'_1} f(z)dz - \oint_{C'_2} f(z)dz - \dots \\
 &= \oint_{C_0} f(z)dz + \oint_{C_1} f(z)dz + \oint_{C_2} f(z)dz + \dots
 \end{aligned}$$

où C est le parcours extérieur fermé et $C'_{0,1,2,\dots}$ ($C_{0,1,2,\dots}$) sont les parcours de rayons infinitésimaux dans le sens horaire (anti-horaire) entourant les singularités isolées $z_{0,1,2,\dots}$. Ici nous avons omis toutes les contributions sur les parcours rectilignes, lesquelles s'annulent deux à deux lorsque les rayons des parcours $C_{0,1,2,\dots}$ tendent vers 0. En utilisant le résultat (1.145) pour chaque C_i , nous avons

$$\boxed{\oint_C f(z)dz = 2\pi i \sum_i R(z_i),} \tag{1.146}$$

qui est connu sous le nom *théorème des résidus*. Ainsi l'évaluation de l'intégrale pour les conditions prescrites se réduit à l'évaluation des résidus de la fonction en ses pôles intérieurs à C .

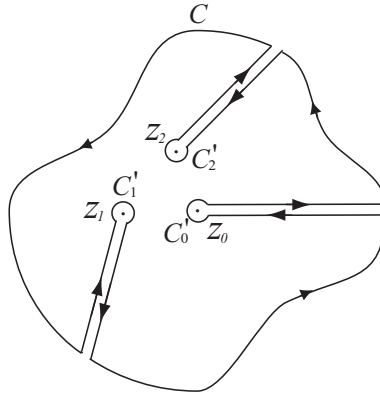


FIGURE 1.12

Parcours d'intégration utilisé dans la démonstration du théorème des résidus, lequel contourne les singularités isolées de la fonction.

Méthodes de calcul du résidu

Série de Laurent. Comme nous l'avons vu précédemment, la *série de Laurent* est une des possibilités de calcul du résidu ; elle s'avère relativement flexible et s'adapte à plusieurs situations. La série de Laurent autour de z_0 peut être construite en posant $z = z_0 + \delta z$:

$$f(z) = f(z_0 + \delta z) \rightarrow \dots + \frac{a_{-2}}{\delta z^2} + \frac{a_{-1}}{\delta z} + a_0 + \dots, \quad (1.147)$$

ce qui permet d'identifier le résidu $R(z_0) = a_{-1}$ en z_0 pour n'importe quel type de pôle, incluant une singularité essentielle en z_0 .

Pôles simples. Dans le cas où la singularité isolée en z_0 est un pôle simple, une approche possible pour trouver le résidu consiste à multiplier la fonction par $(z - z_0)$ pour ensuite prendre la limite $z \rightarrow z_0$, ce qui donne

$$R(z_0) = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) f(z). \quad (1.148)$$

Par exemple, considérons la fonction $f(z) = \cot z = \cos z / \sin z$, laquelle possède un pôle simple en $z_0 = 0$. On peut donc écrire

$$\begin{aligned} R(0) &= \lim_{z \rightarrow 0} \frac{z \cos z}{\sin z} = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{z(1 - z^2/2! + \dots)}{z(1 - z^2/3! + \dots)} \\ R(0) &\rightarrow \frac{z}{z} = 1. \end{aligned} \quad (1.149)$$

Toujours pour le cas d'un pôle simple, si $f(z)$ peut s'écrire sous la forme $f(z) = g(z)/h(z)$, où $g(z)$ est analytique et non nulle au pôle en z_0 et que $h(z_0) = 0$ avec $h'(z_0) \neq 0$, nous aurons en accord avec (1.148)

$$\begin{aligned} R(z_0) &= \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) \frac{g(z)}{h(z)} \\ &= g(z_0) \frac{(z - z_0)}{h'(z_0)(z - z_0)} \\ &= \frac{g(z_0)}{h'(z_0)}. \end{aligned} \quad (1.150)$$

Si on utilise cette expression pour trouver le résidu de $f(z) = \sin z / (1 - z^4)$ qui possède un pôle simple en $z = i$ et qui est de la forme $g(z)/h(z)$, nous aurons $h'(i) = -4i^3 = 4i$ et $g(i) = \sin i = i \sinh 1$, et donc $R(i) = \frac{1}{4} \sinh 1$.

Pôles d'ordre m . Si $f(z)$ a un pôle d'ordre m en $z = z_0$, sa série de Laurent aura la forme

$$a_{-m}(z - z_0)^{-m} + \dots + \frac{a_{-1}}{z - z_0} + a_0 + a_1(z - z_0) + \dots$$

Pour isoler le résidu a_{-1} , il suffit de multiplier la série par $(z - z_0)^m$ et le terme contenant a_{-1} sera alors de la forme $a_{-1}(z - z_0)^{m-1}$. Ainsi, la dérivée d'ordre $m - 1$ de la série $(z - z_0)^m f(z)$ dans la limite $z \rightarrow z_0$ sera proportionnelle à a_{-1} puisque tous les autres termes seront nuls dans cette limite. L'ensemble de ces opérations est résumé dans la formule suivante :

$$R(z_0) = \lim_{z \rightarrow z_0} \left\{ \frac{1}{(m-1)!} \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} (z - z_0)^m f(z) \right\}. \quad (1.151)$$

Cette expression, quoique en apparence générale pour m fini, peut s'avérer fastidieuse à l'utilisation surtout quand les fonctions ont une forme relativement compliquée.

Exemple 1.11 :

A l'aide du théorème des résidus, on se propose de calculer l'intégrale suivante

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{zt}}{z^2(z^2 + 2z + 2)} dz, \quad t > 0, \quad (1.152)$$

où $C : |z| = 3$. L'examen de la fonction à intégrer révèle l'existence d'un pôle double en $z = 0$, ainsi qu'aux zéros de $z^2 + 2z + 2$, soit en $z_{\pm} = -1 \pm i$, lesquels sont des pôles simples de la fonction. Les trois pôles sont intérieurs à C . Nous aurons selon le théorème des résidus, $I = R(0) + R(z_+) + R(z_-)$. Pour le résidu à l'origine, utilisons (1.151) pour trouver

$$\begin{aligned} R(0) &= \lim_{z \rightarrow 0} \frac{1}{1!} \frac{d}{dz} \left(\frac{z^2}{z^2} \frac{e^{zt}}{(z - z_+)(z - z_-)} \right) \\ &= \frac{t}{z_+ z_-} - \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{2}(t - 1). \end{aligned}$$

Pour les pôles simples en z_{\pm} , utilisons (1.148) pour trouver

$$\begin{aligned} R(z_{\pm}) &= \lim_{z \rightarrow z_{\pm}} \left\{ (z - z_{\pm}) \frac{e^{zt}}{z^2(z - z_+)(z - z_-)} \right\} \\ &= \frac{1}{4} e^{(-1 \pm i)t}. \end{aligned}$$

La valeur de l'intégrale est alors donnée par

$$I = \frac{1}{2}(t - 1) + \frac{e^{-t}}{2} \cos t. \quad (1.153)$$

Valeur principale de Cauchy

Il arrive qu'un ou plusieurs *pôles simples* soient situés *sur* le parcours d'intégration d'une fonction méromorphe $f(z)$. On ne peut pas 'passer sur la singularité' sinon l'intégrale divergerait. Cependant, il est possible d'avoir une valeur finie de l'intégrale en excluant du parcours le point de la singularité : c'est la *valeur principale de l'intégrale*. Pour ce faire, on effectue une légère modification du parcours qui évite le pôle afin de rendre l'intégrale finie. Considérons le parcours de la Fig. 1.13 qui contourne le pôle z_0 de deux manières possibles, soit par le haut *via* le demi-cercle C_1 ou par le bas *via* C'_1 . Si on regarde les contributions à l'intégrale sur chacun des parcours C_1 et C'_1 , on constate que pour C_1 , nous avons suivant l'utilisation de la série de Laurent

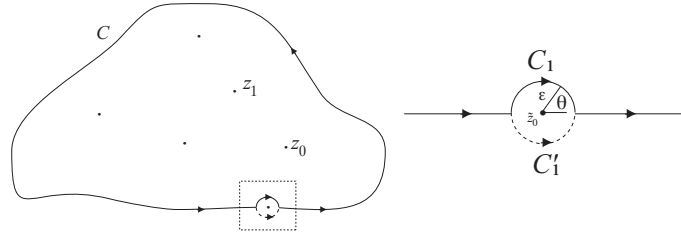


FIGURE 1.13

une intégrale de valeur finie :

$$\begin{aligned} \int_{C_1} f(z) dz &= \int_{C_1} \frac{a_{-1}}{z - z_0} dz \\ &= a_{-1} \int_{\pi}^0 d\theta = -i\pi a_{-1}, \end{aligned} \quad (1.154)$$

alors que pour C'_1 , nous avons

$$\int_{C'_1} f(z) dz = a_{-1} \int_{-\pi}^0 d\theta = +i\pi a_{-1}. \quad (1.155)$$

Ces deux résultats se comprennent intuitivement en considérant (pour un pôle simple) que le parcours en demi-cercle anti-horaire C'_1 donne la moitié du résultat d'un tour complet, soit $\frac{1}{2} \times 2\pi i a_{-1}$, alors que pour C_1 dans le sens horaire, nous avons le même résultat, mais avec un signe moins.

Considérons maintenant l'intégrale sur deux choix de parcours fermés empruntant soit C'_1 ou C_1 . En utilisant le théorème des résidus, nous avons

$$\oint_C f(z) dz = \begin{cases} \int_C f(z) dz + \int_{C'_1} f(z) dz = 2\pi i \sum_{\tilde{z}_0, \tilde{z}_1, \dots} R(\tilde{z}_i) \\ \int_C f(z) dz + \int_{C_1} f(z) dz = 2\pi i \sum_{z_0, \dots} R(z_i), \end{cases} \quad (1.156)$$

où pour le premier (second) parcours, \tilde{z}_0 est intérieur (extérieur), tel qu'illustré à la figure 1.13. La partie de l'intégrale ($\int_C \dots$) dont le parcours exclut C'_1 ou C_1 est appelée *partie principale de Cauchy*. Dans les deux cas, le résultat pour la partie principale est le même et est donné par

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \oint_C f(z) dz &\equiv \int_C f(z) dz \\ &= 2\pi i \sum_{z_0, \dots} R(z_i) + i\pi R(\tilde{z}_0). \end{aligned} \quad (1.157)$$

De manière plus générale, pour plus d'un pôle simple $\tilde{z}_{0,1,\dots}$ sur le parcours, la partie principale de Cauchy est donnée par

$$\mathcal{P} \oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_{z_0, \dots} R(z_i) + i\pi \sum_{\tilde{z}_0, \dots} R(\tilde{z}_i). \quad (1.158)$$

1.3.7 Évaluation d'intégrales définies

L'utilisation de différents contours d'intégration et le théorème des résidus s'avère être d'une très grande versatilité dans le calcul d'intégrales définies. Dans ce qui suit, on se propose d'analyser trois types d'intégrales.

Intégrales de fonctions trigonométriques

La première intégrale est du type

$$I = \int_0^{2\pi} f(\sin \theta, \cos \theta) d\theta, \quad (1.159)$$

définie dans les réels, où f est une fonction unievaluée. On peut se représenter cette intégrale sur un cercle de rayon unité dans le plan complexe (fig. 1.14), en posant $z = e^{i\theta}$, $\sin \theta = (z - z^{-1})/2i$ et $\cos \theta = (z + z^{-1})/2$. L'intégrale prend alors la forme

$$I = -i \oint_C f\left(\frac{z - z^{-1}}{2i}, \frac{z + z^{-1}}{2}\right) \frac{dz}{z}, \quad (1.160)$$

où C est décrit par $|z| = 1$. Par le théorème des résidus, nous pouvons écrire

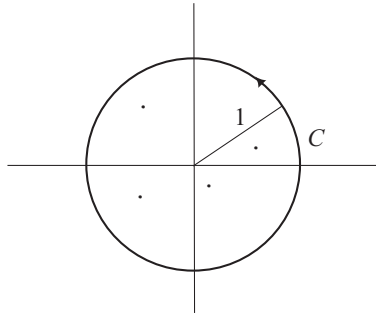


FIGURE 1.14

Parcours d'intégration de rayon unité pour l'intégrale définie de fonctions circulaires.

$$I = 2\pi i \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{-i\frac{f}{z}}, \quad (1.161)$$

où la somme s'effectue sur tous les pôles de $-if/z$, intérieurs à C .

Évidemment, s'il y a des pôles simples \tilde{z}_i situés sur le parcours d'intégration, on est réduit à l'évaluation de la partie principale de l'intégrale,

$$\begin{aligned} I &= -i \oint_C f\left(\frac{z - z^{-1}}{2i}, \frac{z + z^{-1}}{2}\right) \frac{dz}{z}, \\ &= 2\pi i \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{-i\frac{f}{z}} + \pi i \sum_{\tilde{z}_i} R(\tilde{z}_i) \Big|_{-i\frac{f}{z}}, \end{aligned} \quad (1.162)$$

Exemple 1.12 :

Montrer que

$$I = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{a + b \sin \theta} = \frac{2\pi}{\sqrt{a^2 - b^2}}, \quad a > b. \quad (1.163)$$

En utilisant la transformation prescrite, on peut récrire l'intégrale sous la forme

$$\begin{aligned} I &= \oint_C \frac{2}{b} \frac{dz}{z^2 + 2i\frac{a}{b}z - 1} \\ &= \frac{2}{b} \oint_C \frac{dz}{(z - z_+)(z - z_-)}, \end{aligned}$$

où

$$z_{\pm} = \frac{a}{b} i \left(-1 \pm \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}} \right).$$

sont les zéros du dénominateur. Pour $a > |b|$, seulement z_+ est intérieur au cercle C . Comme le pôle est simple, le résidu est donné par

$$\begin{aligned} R(z_+) &= \frac{2}{b} \lim_{z \rightarrow z_+} \left\{ \frac{(z - z_+)}{(z - z_-)(z - z_+)} \right\} \\ &= \frac{2}{b} \frac{1}{z_+ - z_-} \\ &= -i \frac{1}{\sqrt{a^2 - b^2}}, \end{aligned}$$

ce qui, à l'aide de (1.161), conduit au résultat recherché.

Intégrales impropres

Le deuxième type d'intégrale est une intégrale impropre sur l'axe réel de la forme

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx, \quad (1.164)$$

où par prolongement dans le plan complexe, $f(z)$ est supposée analytique dans le demi-plan supérieur, sauf pour un nombre de pôles (simples ou d'ordre plus élevé). S'il y a des pôles simples sur l'axe réel, ils pourront être contournés en utilisant l'approche de la partie principale. De plus, on supposera que $|f(z)|$ décroît plus vite qu'en $1/|z|$ lorsque $|z| = R \rightarrow \infty$ dans le plan supérieur.

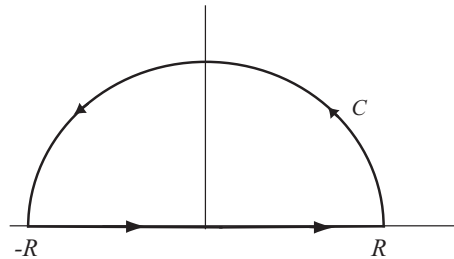


FIGURE 1.15
Parcours d'intégration semi-circulaire.

Dans ces conditions, considérons le prolongement de l'intégration dans le plan complexe avec l'ajout d'un demi-cercle de rayon infini dans le plan supérieur (fig. 1.15), ce qui donne un parcours fermé C . L'intégrale sur

C prend alors la forme

$$\oint_C f(z)dz = \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx}_I + i \int_0^{2\pi} f(Re^{i\theta})Re^{i\theta} d\theta,$$

pour laquelle le premier terme à droite est l'intégrale I recherchée. Lorsque $R \rightarrow \infty$ sur le demi-cercle, l'intégrande s'annule dans le deuxième terme de droite. Dans ces conditions, l'ajout de ce terme n'ajoute rien à l'intégrale. Ainsi par le théorème des résidus, on pourra écrire

$$\begin{aligned} \oint_C f(z)dz &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx \\ &= 2\pi i \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{f(z)}. \end{aligned} \tag{1.165}$$

Exemple 1.13 :

On considère l'intégrale bien connue dans les réels

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2}, \quad a \in \mathbb{R}. \tag{1.166}$$

Cette intégrale peut être rapidement calculée par la méthode des résidus. On vérifie aisément que l'intégrande décroît en $1/z^2$ dans le plan supérieur et possède des pôles en $z_{\pm} = \pm ia$. Il y a donc un seul pôle (simple) dans le plan supérieur, indépendamment si a est négatif ou positif. Le résidu en $R(ia)$ pour $a > 0$, est donné par

$$\begin{aligned} R(ia) &= \lim_{z \rightarrow ia} (z - ia) \frac{1}{(z - ia)(z + ia)} \\ &= \frac{1}{2ia}. \end{aligned}$$

Suivant (1.146), on obtient immédiatement le résultat attendu

$$I = 2\pi i R(ia) = \frac{\pi}{a}.$$

Lemme de Jordan Une intégrale impropre appartenant à la même catégorie peut prendre la forme d'une transformée de Fourier

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{iax} dx, \quad a > 0. \tag{1.167}$$

Suite au prolongement dans le plan complexe de cette intégrale le long du même parcours C considéré précédemment (Fig. 1.15), la contribution le long du demi-cercle du plan supérieur est rigoureusement nul. Ce résultat est connu sous le nom de *lemme de Jordan*.

Afin de démontrer le lemme, la condition sur la fonction $f(Re^{i\theta})$ sur le demi-cercle de rayon infini est telle que $|f(Re^{i\theta})| < \epsilon \rightarrow 0$, qui s'annule lorsque $R \rightarrow \infty$. Pour l'intégrale, nous pouvons alors expliciter la contribution sur le demi-cercle

$$\begin{aligned} \left| i \int_0^{\pi} f(Re^{i\theta})R e^{iaR \cos \theta - aR \sin \theta} d\theta \right| &\leq R \int_0^{\pi} |f(Re^{i\theta})| e^{-aR \sin \theta} d\theta \\ &\leq R\epsilon \int_0^{\pi} e^{-aR \sin \theta} d\theta = 2R\epsilon \int_0^{\frac{\pi}{2}} e^{-aR \sin \theta} d\theta, \end{aligned}$$

où la dernière égalité découle de la parité de la fonction circulaire entre 0 et π . En comparant les fonctions $\frac{2}{\pi}\theta$ et $\sin \theta$ dans l'intervalle $[0, \frac{\pi}{2}]$, on constate que l'inégalité $\frac{2}{\pi}\theta \leq \sin \theta$ est vérifiée sur tout l'intervalle. Nous pouvons alors écrire

$$\begin{aligned} \left| i \int_0^\pi f(Re^{i\theta}) R e^{iaR \cos \theta - aR \sin \theta} d\theta \right| &\leq 2R\epsilon \int_0^{\frac{\pi}{2}} e^{-2aR\theta/\pi} d\theta \\ &\leq \epsilon \frac{\pi}{a} (1 - e^{-a\infty}) \Big|_{\epsilon \rightarrow 0} \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (1.168)$$

ce qui complète la démonstration du lemme de Jordan.

À l'aide de ce résultat et du théorème des résidus, l'intégrale de type transformée de Fourier (1.167) devient

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{iax} dx = 2\pi i \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{f e^{iaz}}, \quad a > 0, \quad (1.169)$$

avec les résidus en z_i situés dans le demi-plan supérieur.

Il est à noter que la généralisation au cas $a < 0$ s'effectue sans difficulté avec cette fois un parcours dans le demi-plan inférieur. En tenant compte du sens horaire du parcours, on trouve

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{iax} dx = -2\pi i \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{f e^{iaz}}, \quad a < 0, \quad (1.170)$$

avec les résidus de la fonction aux pôles de la fonction situés dans le plan demi-plan inférieur.

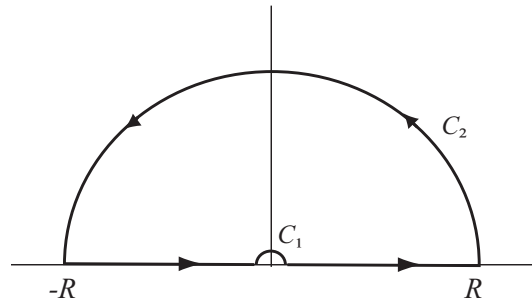


FIGURE 1.16
Parcours d'intégration semi-circulaire.

Exemple 1.14 :

À titre d'exemple, examinons l'intégrale impropre suivante

$$I = \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx. \quad (1.171)$$

Afin de transformer cette intégrale sous une forme similaire à (1.167), on tient compte de la parité de la fonction à

intégrer avec la réécriture

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{1}{2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{0-\epsilon} \frac{\sin x}{x} dx + \int_{0+\epsilon}^{+\infty} \frac{\sin x}{x} dx \right] \\
 &= \frac{1}{2} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin x}{x} dx \\
 &= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left[\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iz}}{z} dz \right] \\
 &\equiv \frac{1}{2} \operatorname{Im} I'.
 \end{aligned}$$

où \mathcal{P} est la partie principale. Maintenant I' est reliée à l'intégrale sur le parcours fermé C (Fig. 1.16)

$$\begin{aligned}
 \oint_C \frac{e^{iz}}{z} dz &= I' + \int_{C_1} \frac{e^{iz}}{z} dz + \int_{C_2} \frac{e^{iz}}{z} dz \\
 &= I' - i\pi \\
 &= 0,
 \end{aligned}$$

qui est nulle selon le théorème des résidus ou de Cauchy. La partie sur C_2 est aussi nulle selon le lemme de Jordan. La partie sur C_1 , effectuée dans le sens horaire, est égale à $-i\pi$. On trouve que $I' = i\pi$ et finalement

$$I = \int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}. \quad (1.172)$$

Intégrales impropres avec fonctions exponentielles

Une autre type d'intégrale que l'on peut considérer à l'aide du théorème des résidus est celle comportant des fonctions exponentielles. En voici un exemple,

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ax}}{1+e^x} dx, \quad 0 < a < 1, \quad (1.173)$$

où la condition sur a assure que la fonction à intégrer s'annule à l'infini. Dans le plan complexe, le dénominateur

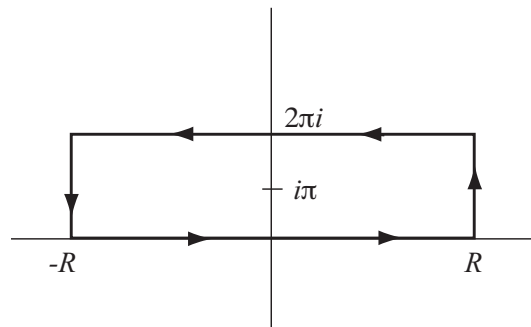


FIGURE 1.17

Parcours d'intégration rectangulaire pour les intégrales impropres avec exponentielles.

de la fonction à intégrer s'annule aux pôles $z_n = (2n+1)i\pi$, $n = 0, \pm 1, \dots$ sur l'axe imaginaire. Considérons le parcours C rectangulaire fermé d'intégration de la figure 1.17, lequel englobe le pôle en $z_0 = i\pi$. Les arêtes verticales partent en $\pm R$ sur l'axe réel et se terminent en $\pm R + i2\pi$ avec $R \rightarrow \infty$. L'intégrale sur C se décompose

sous la forme

$$\begin{aligned} \oint_C \frac{e^{az}}{1+e^z} dz &= \lim_{R \rightarrow \infty} \left[\int_{-R}^{+R} \frac{e^{ax}}{1+e^x} dx + \int_{R+2\pi i}^{-R+2\pi i} \frac{e^{ax}}{1+e^x} dx \right] \\ &\quad + \lim_{R \rightarrow \infty} \left[\int_0^{2\pi i} \frac{e^{a(R+iy)}}{1+e^{(R+iy)}} dy + \int_{2\pi i}^0 \frac{e^{a(-R+iy)}}{1+e^{(-R+iy)}} dy \right] \\ &= (1 - e^{2\pi ia}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ax}}{1+e^x} dx. \end{aligned}$$

Les contributions de la deuxième ligne appartiennent aux arêtes verticales ; elles tendent toutes les deux vers zéro avec les conditions sur a et $R \rightarrow \infty$. Pour les intégrales restantes de la première ligne, par un changement de variable, la deuxième intégrale de la première ligne est similaire à la première, modulo le facteur de phase $e^{2\pi ia}$, ce qui conduit au résultat de la troisième ligne. L'application du théorème des résidus sur la partie gauche permet d'isoler l'intégrale recherchée

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ax}}{1+e^x} dx = \frac{2\pi i}{1 - e^{2\pi ia}} R(i\pi). \quad (1.174)$$

Reste l'évaluation du résidu $R(i\pi)$. Il s'obtient aisément en posant $z = z_0 + \delta z$ pour la fonction à intégrer, soit

$$\begin{aligned} \lim_{\delta z \rightarrow 0} \left[\frac{e^{az_0 + \delta z}}{1 + e^{z_0 + \delta z}} \right] &\rightarrow \frac{e^{az_0} \left(1 + \delta z + \frac{\delta z^2}{2!} + \dots \right)}{1 - \left(1 + \delta z + \frac{\delta z^2}{2!} + \dots \right)} \\ &\rightarrow - \frac{e^{az_0}}{\delta z + \delta z^2/2! + \dots} = - \frac{e^{az_0}}{\delta z} - \dots \end{aligned}$$

Le résidu en $z_0 = i\pi$ est donc $R(i\pi) = -e^{ia\pi}$, ce qui donne en définitive

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ax}}{1+e^x} dx &= -2\pi i \frac{e^{i\pi a}}{1 - e^{2i\pi a}} \\ &= \frac{\pi}{\sin \pi a}. \end{aligned} \quad (1.175)$$

Intégrales avec points de branchement

Considérons l'intégrale de la forme

$$\oint_C z^{\mu-1} f(z) dz, \quad (1.176)$$

sur le parcours C de la Fig. 1.18 avec $\mu > 0$, non entier et élément des réels. $f(z)$ est une fonction analytique sur l'axe réel positif, mais qui peut posséder des pôles à distance finie dans le plan complexe. On suppose de plus que $|z^\mu f(z)| \rightarrow 0$ lorsque $z \rightarrow 0$ (∞). Les points de branchement sont à $z = 0$ et $z = \infty$. L'union des deux permet de définir une ligne de coupure sur l'axe des réels positifs de manière à ce que $z^{\mu-1} f(z)$ soit univaluée sur le parcours C tracé à la figure 1.18.

Décomposons le parcours fermé $C = C_1 + C_2 + C_3 + C_4$ en quatre parties $C_{1,2,3,4}$. Le parcours total fermé C englobe les pôles de $f(z)$ et donc par le théorème des résidus, on peut écrire

$$\oint_{C=\sum_i C_i} z^{\mu-1} f(z) dz = 2\pi i \sum_{z_i} z^{\mu-1} f(z) \Big|_{\text{pôles def}}. \quad (1.177)$$

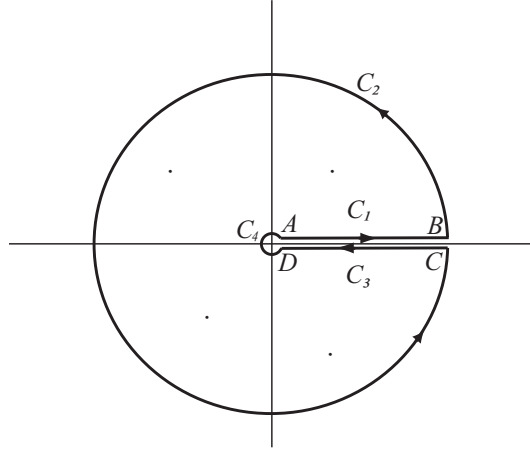


FIGURE 1.18

Parcours d'intégration pour intégrales avec point de branchement à l'origine.

Analysons les contributions sur chaque partie du parcours fermé. Considérons en premier lieu le parcours C_4 autour de l'origine en posant $z = \epsilon e^{i\theta}$ où $\epsilon \rightarrow 0$, nous aurons

$$\begin{aligned} \int_{C_4} z^{\mu-1} f(z) dz &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{2\pi}^0 (\epsilon e^{i\theta})^{\mu-1} f(\epsilon e^{i\theta}) \epsilon e^{i\theta} d\theta \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{2\pi}^0 e^{i\mu\theta} \epsilon^\mu f(\epsilon e^{i\theta}) d\theta \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (1.178)$$

ce qui s'annule par hypothèse. Si on regarde la partie circulaire extérieure en C_2 , en posant $z = R e^{i\theta}$ on trouve également par hypothèse

$$\int_{C_2} z^{\mu-1} f(z) dz = \lim_{R \rightarrow \infty} i \int_0^{2\pi} e^{i\mu\theta} R^\mu f(R e^{i\theta}) d\theta \rightarrow 0. \quad (1.179)$$

Les contributions à l'intégrale se réduisent alors aux segments C_1 (\overline{AB}) et C_3 (\overline{CD}). Dans le premier cas, nous aurons

$$\begin{aligned} \int_{C_1} z^{\mu-1} f(z) dz &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{0+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} x^{\mu-1} f(x) dx \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty (x+i\epsilon)^{\mu-1} f(x+i\epsilon) dx, \end{aligned} \quad (1.180)$$

alors que pour le second segment,

$$\begin{aligned} \int_{C_3} z^{\mu-1} f(z) dz &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\infty-i\epsilon}^{0-i\epsilon} x^{\mu-1} f(x) dx \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_\infty^0 (x-i\epsilon)^{\mu-1} f(x-i\epsilon) dx. \end{aligned} \quad (1.181)$$

Or si f est analytique sur l'axe réel positif, on a $f(x \pm i\epsilon) \rightarrow f(x)$ pour $\epsilon \rightarrow 0$. Par contre, pour les parties associées au point de branchement pour chacune des intégrales, $(x-i\epsilon)^{\mu-1} = e^{i2\pi(\mu-1)}(x+i\epsilon)^{\mu-1}$ en raison des points A et D qui diffèrent d'un angle tendant vers 2π à la limite $\epsilon \rightarrow 0$. En combinant les deux intégrales

restantes, on trouve

$$\begin{aligned} \oint_C z^{\mu-1} f(z) dz &= (1 - e^{i2\pi(\mu-1)}) \int_0^\infty x^{\mu-1} f(x) dx \\ &= 2\pi i \sum_{\text{résidus}} z^{\mu-1} f(z). \end{aligned} \quad (1.182)$$

On en conclut que l'expression suivante pour l'intégrale sur l'axe réel prend la forme

$$\int_0^\infty x^{\mu-1} f(x) dx = \frac{2\pi i}{1 - e^{i2\pi\mu}} \sum_{z_i} z_i^{\mu-1} f(z_i) \Big|_{\text{pôles de } f}. \quad (1.183)$$

Exemple 1.15 :

Soit l'intégrale impropre

$$I = \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{x}(x+a)^3} dx, \quad (1.184)$$

où $a > 0$. Cette intégrale est de la forme (1.176) avec $\mu = \frac{1}{2}$ et $f(z) = 1/(z+a)^3$. On vérifie également que $|z^\mu f(z)| \rightarrow 0$ sur C_4 et C_2 . $f(z)$ possède un pôle triple en $z = -a$. Le résidu en ce point se trouve aisément en posant $z = -a + \delta z$, soit

$$\begin{aligned} \frac{1}{\delta z^3(-a + \delta z)^{1/2}} &= \frac{1}{i\delta z^3(a - \delta z)^{1/2}} \\ &= \frac{1}{ia^{1/2}\delta z^3\left(1 - \frac{\delta z}{a}\right)^{1/2}} \\ &= \frac{1}{ia^{1/2}\delta z^3} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\delta z}{a} + \frac{3}{8} \frac{\delta z^2}{a^2} + \dots\right) \\ &= \frac{1}{ia^{1/2}\delta z^3} + \frac{1}{2ia^{3/2}\delta z^2} + \frac{3}{i8a^{5/2}} \frac{1}{\delta z} + \dots, \end{aligned} \quad (1.185)$$

d'où $R(-a) = -i\frac{3}{8}a^{-5/2}$. L'intégrale vaut alors

$$\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{x}(x+a)^3} dx = \frac{3\pi}{4} \frac{a^{-5/2}}{1 - e^{i\pi}} = \frac{3\pi}{8} a^{-5/2}. \quad (1.186)$$

1.4 Sommation de séries

Une autre application intéressante du théorème des résidus est celle de la sommation de certains types de séries. Considérons par exemple une série de la forme

$$S = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(n) \quad (1.187)$$

Selon certaines conditions sur f que l'on précisera, on peut établir un lien direct entre cette somme et une intégrale dans le plan complexe. Pour ce faire, on utilise une *fonction auxiliaire* qui possède des pôles simples précisément en $z = n$ sur l'axe réel et qui est bornée à l'infini. Pour le type de série (1.187), on peut utiliser par exemple la fonction $\pi \cot \pi z$, qui possède des pôles simples en $z = z_n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Le résidu en ces points s'obtient en posant $z = z_n + \delta z$

$$\begin{aligned} \pi \cot(\pi z_n + \delta z) &= \pi \frac{\cos(\pi z_n + \delta z)}{\sin(\pi z_n + \delta z)} \\ &= \pi \frac{(-1)^n \cos(\pi \delta z)}{(-1)^n \sin(\pi \delta z)} \\ &\rightarrow \frac{1}{\delta z} + \dots \quad (\delta z \rightarrow 0). \end{aligned} \quad (1.188)$$

La fonction auxiliaire possède donc des pôles simples en z_n et le résidu en ces points est égal à l'unité. Si on prolonge maintenant $f(n \rightarrow z)$ dans le plan complexe et que l'on considère l'intégrale

$$\oint_C \pi \cot \pi z f(z) dz, \quad (1.189)$$

où C est le parcours circulaire de rayon $R \rightarrow \infty$ entourant les pôles de la fonction auxiliaire en z_n , ainsi que ceux de $f(z)$ (Fig. 1.19). On supposera que $|f(z)| \rightarrow M/|z|^k$ avec $k > 1$ qui décroît plus vite qu'en $1/|z|$ lorsque $|z| \rightarrow \infty$.

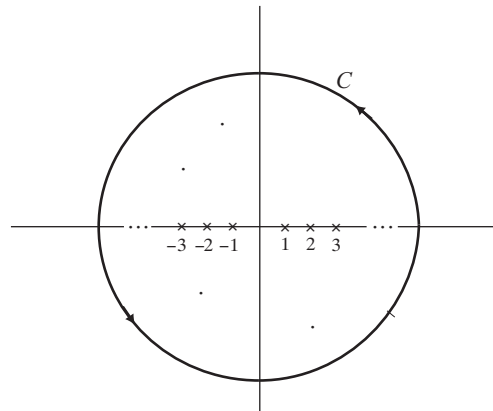


FIGURE 1.19

Parcours d'intégration pour la sommation de séries comportant des nombres entiers. Les croix symbolisent l'emplacement des pôles simples de la fonction auxiliaire et les points ceux du prolongement de l'argument de la série dans le plan complexe.

Quant à la fonction auxiliaire, il faut s'assurer que celle-ci soit bornée en module sur C . On le vérifie en passant en représentation polaire

$$|\cot(\pi R r e^{i\theta})| = \frac{|e^{i\pi R(\cos\theta + i\sin\theta)} + e^{-i\pi R(\cos\theta + i\sin\theta)}|}{|e^{i\pi R(\cos\theta + i\sin\theta)} - e^{-i\pi R(\cos\theta + i\sin\theta)}|}$$

$$\leq \begin{cases} \frac{1 + e^{-2\pi R \sin\theta}}{1 - e^{-2\pi R \sin\theta}} \rightarrow 1, & \pi > \theta > 0 \\ \frac{1 + e^{2\pi R \sin\theta}}{1 - e^{2\pi R \sin\theta}} \rightarrow 1, & 2\pi > \theta > \pi, \end{cases} \quad (1.190)$$

où nous avons utilisé l'inégalité du triangle au numérateur et au dénominateur⁹. La fonction auxiliaire est donc bornée sur C et ce, même en $\theta = 0$ ou $\theta = 2\pi$, si C évite un pôle en z_n . Nous pouvons écrire

$$\left| \oint_C \pi \cot \pi z f(z) dz \right| \leq \oint_C |\pi \cot \pi z| |f(z)| dz$$

$$\leq A \frac{M}{R^k} 2\pi R \rightarrow 0, \quad R \rightarrow \infty. \quad (1.191)$$

L'intégrale dans ces conditions s'annule sur C à $R \rightarrow \infty$. D'autre part, selon le théorème des résidus, nous avons également

$$\oint_C \pi \cot \pi z f(z) dz = 0 = 2\pi i \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(n) + 2\pi i \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{\pi f(z) \cot \pi z}. \quad (1.192)$$

On peut alors établir

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(n) = - \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{\pi f(z) \cot \pi z}, \quad (1.193)$$

où $R(z_i)$ sont les résidus de $\pi f(z) \cot \pi z$ aux pôles z_i de $f(z)$.

De même, en utilisant la fonction auxiliaire $\pi \csc \pi z$ qui a aussi des pôles en z_n , mais avec résidu $(-1)^n$, nous pouvons effectuer la somme de séries alternées

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-1)^n f(n) = - \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{\pi f(z) \csc \pi z}. \quad (1.194)$$

On pourrait montrer de manière analogue que les séries impliquant des nombres demi-entiers peuvent être aussi sommées à l'aide des fonctions auxiliaires $\tan \pi z$ et $\sec \pi z$ dont les pôles sont situés en $z_n = (2n + 1)/2$, avec respectivement les résidus 1 et $(-1)^n$, ce qui permet d'écrire

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} f\left(\frac{2n+1}{2}\right) = \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{\pi f(z) \tan \pi z} \quad (1.195)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-1)^n f\left(\frac{2n+1}{2}\right) = \sum_{z_i} R(z_i) \Big|_{\pi f(z) \sec \pi z}. \quad (1.196)$$

9. L'inégalité du triangle est donnée par

$$|z_1| - |z_2| \leq |z_1 + z_2| \leq |z_1| + |z_2|.$$

Exemple 1.16 :

Montrer que

$$S = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}. \quad (1.197)$$

La fonction $f(z) = 1/z^4$ décroît plus vite qu'en $1/z$ et remplit les conditions énoncées pour effectuer la sommation. Au préalable, on ajoute une série pour $n \leq -1$, ce qui permet d'utiliser les conditions d'intégration ci-dessus et selon (1.193), on peut alors écrire

$$\sum_{n=-\infty}^{-1} \frac{1}{n^4} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = -R(0) \Big|_{(\pi \cot \pi z)/z^4} = 2S. \quad (1.198)$$

Le calcul du résidu en $z = 0$ de $\pi \cot \pi z f(z)$ s'obtient par le développement de $\pi \cot \pi z / z^4$ autour de $z = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\pi \cot \pi z}{z^4} \Big|_{z \rightarrow 0} &= \pi \frac{1 - \frac{(\pi z)^2}{2!} + \frac{(\pi z)^4}{4!} - \dots}{z^4 \pi z \left(1 - \frac{(\pi z)^2}{3!} + \frac{(\pi z)^4}{5!} - \dots\right)} \\ &= \frac{1}{z^5} \left(1 - \frac{(\pi z)^2}{2!} + \frac{(\pi z)^4}{4!} - \dots\right) \left(1 + \frac{(\pi z)^2}{3!} - \frac{(\pi z)^4}{5!} + \frac{(\pi z)^4}{(3!)^2} \dots\right) \\ &= \frac{1}{z^5} \left(1 + (\pi z)^2 \left(-\frac{1}{2!} + \frac{1}{3!}\right) + (\pi z)^4 \left(\frac{1}{4!} - \frac{1}{5!} + \frac{1}{(3!)^2} - \frac{1}{3!2!}\right) + \dots\right) \\ &= \frac{1}{z^5} - \frac{\pi^2}{3} \frac{1}{z^3} - \frac{\pi^4}{90} \frac{2}{z} + \dots, \end{aligned} \quad (1.199)$$

ce qui donne

$$R(0) \Big|_{(\pi \cot \pi z)/z^4} = -2 \frac{\pi^4}{90}. \quad (1.200)$$

En tenant compte de la parité de la somme de part et d'autre de $n = 0$ en (1.198), le résidu affecté d'un signe moins est égal à $2S$. On obtient alors le résultat demandé :

$$S = \frac{\pi^4}{90}. \quad (1.201)$$

1.5 Transformations de Hilbert et relations de Kramers-Kronig

Considérons l'intégrale

$$\oint_C \frac{f(z)}{z - \omega} dz, \quad \omega \in \mathbb{R}, \quad (1.202)$$

où le parcours C est donné à la figure 1.20 et ω est sur l'axe réel. On supposera que $f(z)$ est analytique dans le plan supérieur et que $f(z = Re^{i\theta}) \rightarrow 0$ tendra vers zéro suffisamment rapidement pour que la contribution à l'intégrale sur le demi-cercle de rayon $R \rightarrow \infty$ soit nulle. Par le théorème de Cauchy, il s'ensuit que l'intégrale (1.202) est nulle. La décomposition de l'intégrale implique alors

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int \frac{f(x)}{x - \omega} dx &= - \int_{C_1} \frac{f(z)}{z - \omega} dz \\ &= i\pi f(\omega). \end{aligned} \quad (1.203)$$

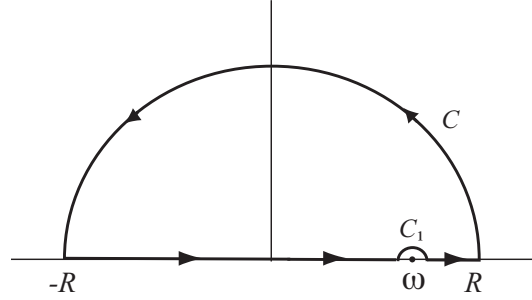


FIGURE 1.20
Parcours d'intégration pour les transformations de Hilbert.

Maintenant comme $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, nous aurons

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{u(x) + iv(x)}{x - \omega} dx = i\pi u(\omega) - \pi v(\omega).$$

En égalant les parties réelle et imaginaire, nous pouvons établir une relation entre u et v , à savoir

$$v(\omega) = -\frac{\mathcal{P}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{u(x)}{x - \omega} dx \quad (1.204)$$

et

$$u(\omega) = \frac{\mathcal{P}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{v(x)}{x - \omega} dx, \quad (1.205)$$

connues sous le nom de *transformées de Hilbert*. Ces relations trouvent de nombreuses applications en physique théorique où elles portent le nom de *relations de Kramers-Kronig*. Comme nous le verrons plus loin, ces relations peuvent être vues une conséquence directe du principe de *causalité* en physique.

Comme cas particulier de ces transformées, considérons le cas où la fonction $f(x)$ sur l'axe réel satisfait à la propriété suivante $f^*(x) = f(-x)$, les parties réelle et imaginaire auront une parité bien définie sur l'axe réel :

$$\begin{aligned} u(x) &= u(-x), \\ v(x) &= -v(-x). \end{aligned}$$

Ces relations sont appelées *relations de croisement*.

Dans ce cas, les transformations de Hilbert prennent alors la forme particulière

$$v(\omega) = -\frac{\mathcal{P}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\omega u(x)}{x^2 - \omega^2} dx \quad (1.206)$$

et

$$u(\omega) = \frac{\mathcal{P}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2xv(x)}{x^2 - \omega^2} dx. \quad (1.207)$$

Causalité et relations de Kramers-Kronig

L'existence de relations Kramers-Kronig en physique est en fait une conséquence directe du principe de causalité caractérisant les phénomènes physiques, à savoir que 'l'effet ne peut pas précéder la cause'.

Considérons par exemple la réponse (effet) linéaire à une perturbation (cause) $h(t)$ au temps t qui est définie sous la forme d'un produit de convolution

$$M(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(t - t')h(t')dt', \quad (1.208)$$

où $M(t)$ est une quantité physique mesurable au temps t suite à l'action du champ h au temps t' . Il pourrait s'agir par exemple de la réponse d'aimantation d'un système suite à l'application d'un champ magnétique ou encore à celle de la polarisation électrique induite suite à l'application d'un champ électrique, etc. Ici $\chi(t-t')$ est appelée *susceptibilité* ou *fonction de réponse* du système étudié sous l'action de h . Cette fonction admet une transformée de Fourier de type temps-fréquence :

$$\chi(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \quad (1.209)$$

Si le système est causal, l'effet sur $M(t)$ en t ne peut précéder la cause $h(t')$ en t' ; alors $M(t) = 0$ si $t < t'$, ce qui implique que par causalité, la réponse

$$\chi(t-t') = 0, \quad \text{si } t-t' < 0.$$

Par ailleurs, la réponse en fréquence $\chi(\omega)$ s'annule à fréquence infinie : dans cette limite, le système ne répond plus à l'excitation externe. Si on considère ω comme une variable complexe, cela implique que $\chi(\omega = Re^{i\theta}) \rightarrow 0$ si $R \rightarrow \infty$. Finalement pour les mêmes conditions de temps, $t-t' < 0$, nous aurons le long d'un parcours en demi-cercle de rayon R dans plan supérieur,

$$\begin{aligned} e^{-i\omega(t-t')} &= e^{iR(\cos\theta + i\sin\theta)(t-t')} \\ &= e^{iR\cos\theta} e^{R\sin\theta(t-t')} \Big|_{R \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad t-t' < 0, \end{aligned}$$

qui s'annule pour $0 < \theta < \pi$. Ainsi par application du lemme de Jordan, l'intégrale

$$\begin{aligned} \chi(t-t') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega + \int_0^{2\pi} \chi(Re^{i\theta}) e^{iR(\cos\theta + i\sin\theta)(t-t')} iRe^{i\theta} d\theta \\ &= \oint_C \chi(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega = 0, \quad t-t' < 0, \end{aligned} \quad (1.210)$$

sera nulle sur un parcours fermé du type de la figure 1.15. Par le théorème de Morera en (1.112), on en conclut que pour une fonction causale imposant $\chi(t-t') = 0$ à $t-t' < 0$, la composante (spectrale) de Fourier, $\chi(\omega)$, se doit d'être analytique dans le plan supérieur : tous les pôles de cette fonction sont situés dans le plan inférieur.

De cette manière, les parties réelle et imaginaire de $\chi(\omega) = \text{Re}[\chi(\omega)] + i\text{Im}[\chi(\omega)]$, sont reliées par une transformation de Hilbert de la forme (1.204-1.205),

$$\text{Re}[\chi(\omega)] = \frac{\mathcal{P}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im}[\chi(\omega')]}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (1.211)$$

et

$$\text{Im}[\chi(\omega)] = -\frac{\mathcal{P}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re}[\chi(\omega')]}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (1.212)$$

Ce sont les relations Kramers-Kronig, conséquence directe du principe de causalité dans la réponse d'un système à une perturbation extérieure.

Relations Kramers-Kronig en optique

Si on considère la propagation d'une onde électromagnétique monochromatique de fréquence ω et de vecteur d'onde k dans un milieu conducteur d'indice de réfraction $n = ck/\omega$ où c est la vitesse de la lumière. Selon les équations de Maxwell, le champ électrique de l'onde est régi par l'équation d'onde suivante (unités CGS) :

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \frac{1}{c^2} 4\pi\sigma\mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0 \quad (1.213)$$

où ϵ est la constante diélectrique, σ est la conductivité et μ est la perméabilité magnétique que l'on fixera à $\mu = 1$, pour la suite.

Si on regarde la possibilité d'une solution à l'équation d'onde de type onde plane $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{ik \cdot \mathbf{r} - i\omega t}$, sa substitution dans l'équation nous amène à l'équation

$$k^2 = \epsilon \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + i \frac{4\pi\sigma}{\epsilon\omega} \right), \quad (1.214)$$

qui doit être satisfaite pour un ω donné. La présence du terme d'amortissement dû à la conductivité finie introduit une partie imaginaire pour le vecteur d'onde, qui est source d'atténuation pour l'onde.

En fonction de ω , on introduit le carré de l'indice de réfraction

$$n^2(\omega) = c^2 \frac{k^2}{\omega^2} = \epsilon(\omega) + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega}. \quad (1.215)$$

À fréquence $\omega \rightarrow \infty$, le milieu diélectrique et conducteur ne répond plus à l'excitation électromagnétique et $n(\omega \rightarrow \infty) \rightarrow 1$ retrouve sa valeur dans le vide. Il est utile de considérer la quantité $n^2(\omega) - 1$, qui elle, tend vers zéro lorsque $\omega \rightarrow \infty$; elle est une quantité spectrale issue des équations de Maxwell et est donc causale. De plus, selon les équations de Maxwell, on observe la parité en ω de la constante diélectrique $\epsilon(\omega) = \epsilon(-\omega)$ et de la conductivité $\sigma(\omega) = \sigma(-\omega)$. Ainsi $\text{Re}[n^2(\omega) - 1] = \epsilon(\omega) - 1$ sera paire en ω , alors que $\text{Im}[n^2(\omega) - 1] = 4\pi\sigma(\omega)/\omega$ sera impaire. Selon (1.206) et (1.207), nous pourrons écrire

$$\text{Re}[n^2(\omega) - 1] = \frac{\mathcal{P}}{\pi} \int_0^\infty 2\omega' \frac{\text{Im}[n^2(\omega') - 1]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (1.216)$$

$$\text{Im}[n^2(\omega) - 1] = -\frac{\mathcal{P}}{\pi} \int_0^\infty 2\omega \frac{\text{Re}[n^2(\omega') - 1]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad (1.217)$$

$$(1.218)$$

lesquelles, sont les relations proposées par Kramers (1926) et Kronig (1927). Ces relations relient l'absorption optique $\text{Im}[n^2(\omega) - 1]$ à la constante diélectrique $\epsilon(\omega) - 1$ et vice et versa. Ce genre de relation est fort utile puisque la mesure de l'une à l'intérieur d'une gamme suffisamment grande en fréquence permet d'obtenir l'autre par la transformation Kramers-Kronig. Cette transformation est couramment utilisée pour de nombreuses quantités spectrales en physique.

1.6 Méthode du col

Nous rencontrons fréquemment en physique théorique des intégrales impropres que nous pouvons évaluer de manière approchée dans la limite dite asymptotique. Une méthode très utile pour y parvenir est la *méthode du col*, aussi appelée *method of steepest descents* ou encore *saddle point method* dans la terminologie anglo-saxonne. Elle s'applique avec succès lorsque nous pouvons exprimer notre intégrale sous la forme

$$I(\tau) = \int_C g(z) e^{\tau f(z)} dz, \quad \tau \gg 1, \quad (1.219)$$

où le parcours ouvert C est situé dans une région où $g(z) e^{\tau f(z)}$ est analytique et s'annule aux extrémités du parcours. Ici $g(z)$ varie lentement comparativement à $e^{\tau f(z)}$. On s'intéressera au cas où le paramètre $\tau \gg 1$ est grand et réel. En guise de préambule à l'exposition de la méthode du col, le théorème de Jensen, aussi appelé théorème du module maximum/minimum, est utile. En voici l'énoncé :

Théorème : Si $f(z)$ est analytique et ne possède pas de zéros dans une région \mathcal{R} du plan complexe, elle ne peut avoir ni minimum ni maximum dans \mathcal{R} , mais seulement des points de selle, également appelés cols qui sont des maximums ou des minimums locaux.

Preuve : Selon la formule de Cauchy pour une fonction $f(z)$ analytique dans \mathcal{R} ,

$$\oint_C \frac{f(z)}{z-a} dz = 2\pi i f(a), \quad (1.220)$$

où a est intérieur au parcours simple C fermé. Comme $f(z)$ est analytique, le parcours peut être déformé vers un cercle de rayon ρ centré en a . En posant $z-a = \rho e^{i\theta}$, la formule prend alors la forme

$$\begin{aligned} f(a) &= \frac{1}{2\pi\rho} \int_0^{2\pi} f(a + \rho e^{i\theta}) \rho d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(a + \rho e^{i\theta}) d\theta, \end{aligned} \quad (1.221)$$

qui est en fait la valeur moyenne de $f(z)$ sur le parcours circulaire. C'est la *formule de Gauss sur la valeur moyenne*. Il en découle

$$|f(a)| \leq M_C, \quad (1.222)$$

où M_C est la valeur maximale de f sur C .¹⁰ Le maximum de $f(z)$ est donc situé sur le parcours et non à l'intérieur. Comme a est arbitrairement choisi dans \mathcal{R} , $f(z)$ n'a donc pas de maximum dans la région d'analyticité. Pour le minimum, l'absence de zéros implique que $1/f(z)$ est aussi analytique, et donc par le même argument $1/|f(z)|$ n'a pas de maximum, alors $f(z)$ n'a pas de minimum. Ceci complète la démonstration du théorème.

Comme nous l'avons vu précédemment, l'intégration d'une fonction dans sa région d'analyticité permet de déformer à notre guise le contour d'intégration C dans cette région sans changer la valeur de l'intégrale. Le but de la méthode du col sera donc de choisir le parcours qui nous permettra une évaluation simple, mais approchée de sa valeur exacte dans la limite $\tau \gg 1$. Le parcours d'intégration sélectionné, que l'on notera C_2 , doit en fait passer par le col de $f(z)$.

Pour s'en convaincre, considérons la fonction $f(z) = f_1(x, y) + i f_2(x, y)$ de l'argument de l'exponentielle de (1.219), et regardons dans un premier temps le point $z_0 = x_0 + i y_0$ où la partie réelle $f_1(z_0)$ est grande (i.e., où l'intégrande pourra prendre des valeurs maximales). Comme $f_1'(z_0) = 0$ en ce maximum (local), nous avons par les conditions Cauchy-Reimann, $f_2'(z_0) = 0$ pour la partie imaginaire, ce qui donne au total

$$f'(z_0) = 0. \quad (1.223)$$

Cette équation permettra d'établir l'emplacement du col. On le vérifie par l'analyticité de la fonction $f(z)$ qui implique que f_1 et f_2 sont des fonctions harmoniques, à savoir $\nabla^2 f_{1,2} = 0$. Par la décomposition du laplacien, cela peut s'écrire

$$\frac{\partial^2 f_{1,2}}{\partial x^2} = -\frac{\partial^2 f_{1,2}}{\partial y^2}. \quad (1.224)$$

Cette relation indique que la partie réelle (ou imaginaire) a une courbure inversée selon des directions orthogonales. En z_0 , $f_1(z_0)$ passe par un maximum selon la direction x , alors qu'elle passe par un minimum en z_0 , si on se déplace selon y . $f(z)$ présente donc un col en z_0 et la condition (1.223) permet en effet de localiser son emplacement dans le plan complexe (voir l'exemple en Figure 1.21-a).¹¹

Comme il s'agit d'une intégration dans le plan complexe à deux dimensions, il y a une infinité de parcours d'intégration pouvant passer par z_0 . Si on veut maximiser la contribution à l'intégrale au voisinage immédiat de z_0 , nous devons donc déterminer le parcours C_2 avec l'angle d'approche qui donne la variation la plus rapide

10. Cette inégalité provient de la valeur absolue de l'intégrale de la valeur moyenne qui s'exprime sous forme de la valeur absolue d'une somme de Reimann, laquelle obéit à l'inégalité du triangle : $|\sum_i \delta I_i| \leq \sum_i |\delta I_i|$.

11. Notons toutefois que plusieurs cols en z_{0i} avec $i = 1, \dots$, peuvent être présents dans la région d'analyticité.

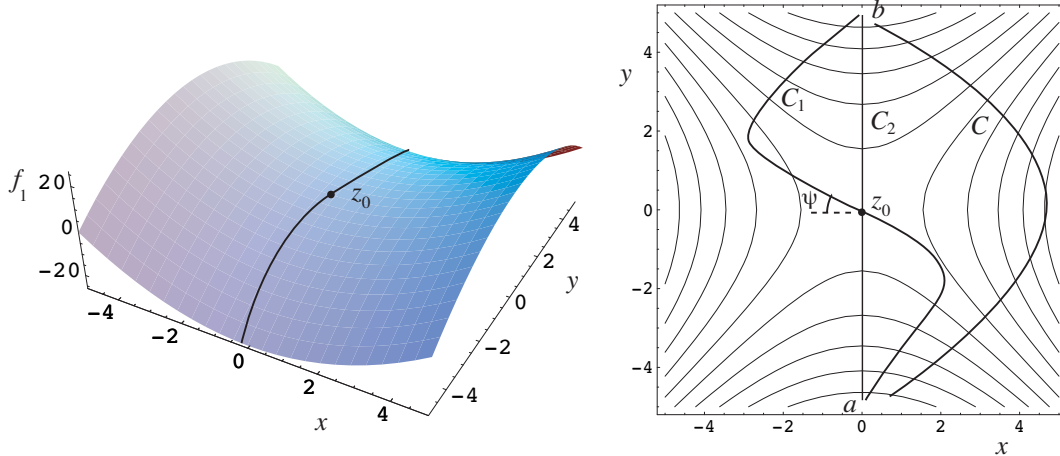


FIGURE 1.21

a) Illustration de la partie réelle d'une fonction harmonique $f_1(x, y) = y^2 - x^2$ près du col en $z_0 = 0$. Le trait plein indique la variation de la fonction sur le parcours C_2 de courbure négative maximale (*steepest descent*); b) contours de f_1 avec la déformation du parcours vers C_2 pour lequel la variation de la pente est maximale avec $\psi = \pi/2$ dans cet exemple.

de f_1 vers sa valeur maximale (Fig 1.21), et qui devra en même temps minimiser l'effet des oscillations du facteur $e^{i\tau f_2(z)}$ provenant de la partie imaginaire. Cet angle que l'on notera ψ , apparaît dans la partie angulaire de l'élément d'intégration dz exprimé en coordonnées polaires

$$\begin{aligned} dz &= dx + idy \\ &= \left(\frac{\partial x}{\partial s} + i \frac{\partial y}{\partial s} \right) ds \\ &= e^{i\psi} ds, \end{aligned} \tag{1.225}$$

où $ds = |dz|$, $\partial x/\partial s = \cos \psi$ et $\partial y/\partial s = \sin \psi$. Exprimons maintenant la pente de $f_1(x, y)$ à maximiser en fonction de ψ :

$$\begin{aligned} \frac{df_1}{ds} &= \frac{\partial f_1}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial f_1}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial s} \\ &= \frac{\partial f_1}{\partial x} \cos \psi + \frac{\partial f_1}{\partial y} \sin \psi. \end{aligned} \tag{1.226}$$

La condition de pente maximale $d^2 f_1/d\psi ds = 0$ et les conditions de Cauchy-Reimann permettent d'établir

$$\begin{aligned} -\frac{\partial f_1}{\partial x} \sin \psi + \frac{\partial f_1}{\partial y} \cos \psi &= 0, \\ -\left(\frac{\partial f_2}{\partial y} \sin \psi + \frac{\partial f_2}{\partial x} \cos \psi \right) &= 0, \\ \frac{df_2}{ds} &= 0. \end{aligned} \tag{1.227}$$

Si maintenant C_2 est choisi tel que la pente de la partie réelle soit maximale, $f_2(z)$ devient alors une constante au voisinage de z_0 , ce qui élimine les oscillations de $e^{i\tau f_2(z)} \approx e^{i\tau f_2(z_0)}$ dans l'intégrale et permettra d'extraire ce facteur de l'intégrale. Suite au développement de l'intégrande autour du col pour l'angle d'approche optimal donné, (1.219) devient une intégrale sur la variable réelle s :

$$I(\tau) \approx e^{i\tau f_2(z_0)} \int_{C_2} ds \frac{dz}{ds} (g(z_0) + \dots) e^{\tau f_1(z_0) + \frac{\tau}{2} \frac{d^2 f_1}{ds^2} \Big|_{z_0} (s-s_0)^2 + \dots}, \tag{1.228}$$

où le développement de l'argument $f(z)$ peut s'exprimer en fonction de la variable réelle $s - s_0$ avec $f_2(z)$ constante. Selon (1.225), $dz/ds = e^{i\psi}$ et

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2 f_1}{ds^2} \right|_{z_0} &= \left. \frac{d^2 f_1}{dz^2} \right|_{z_0} \left(\frac{dz}{ds} \right)^2 \\ &= |f''(z_0)| e^{i(2\psi + \text{Arg}[f''(z_0)])}, \end{aligned} \quad (1.229)$$

où nous avons remplacé $f_1''(z_0)$ par $f''(z_0)$ dans la dernière ligne puisque $f_2(z)$ est une constante. Le choix de ψ tel que la phase totale serait 0 ou 2π , conduisant à coefficient réel et positif, est à éliminer puisque la fonction à intégrer croîtrait alors le plus rapidement possible (parcours perpendiculaire à la ligne pleine tracée dans l'exemple de la figure 1.21-a) et ne s'annulerait pas aux extrémités, ce qui est contraire à l'hypothèse de départ. En fait, le meilleur angle ψ sera celui qui rendra (1.229) le plus négatif possible (*the steepest descent*) de manière à maximiser la pente et obtenir un parcours avec l'annulation de l'intégrande aux extrémités du parcours. L'argument total du facteur de phase (1.229) sera donc égal à π , ce qui conduit pour l'angle d'approche optimal

$$\psi = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} \text{Arg}[f''(z_0)]. \quad (1.230)$$

Comme approximation du col à l'ordre dominant dans le développement, nous aurons

$$I(\tau) \approx e^{\tau f(z_0)} g(z_0) e^{i\psi} \int_{a \rightarrow -\infty}^{b \rightarrow +\infty} e^{-\frac{\tau}{2} |f''(z_0)| (s-s_0)^2} ds, \quad (1.231)$$

où les bornes a et b ont été poussées à l'infini. L'erreur est d'autant plus faible que le paramètre τ est grand. L'intégrale gaussienne est effectuée sans difficulté pour donner

$$\boxed{I(\tau) \approx e^{\tau f(z_0)} g(z_0) e^{i\psi} \sqrt{\frac{2\pi}{\tau |f''(z_0)|}}.} \quad (1.232)$$

Formule de Stirling Dans cet exemple, nous cherchons à utiliser la méthode du col pour l'obtention d'une approximation à $n!$ dans la limite $n \gg 1$. Cette forme approximative est connue sous la nom de formule de Stirling. Le point de départ est la représentation intégrale de la fonction gamma $\Gamma(1+n) = n!$:

$$\Gamma(1+n) = \int_0^{\infty} x^n e^{-x} dx. \quad (1.233)$$

Afin d'exprimer cette intégrale sous la forme (1.219), nous pouvons effectuer le changement de variable $x = yn$, ce qui donne

$$\Gamma(1+n) = n^{n+1} \int_0^{\infty} e^{n(\ln y - y)} dy. \quad (1.234)$$

En prolongeant dans le plan complexe où $y \rightarrow z$, on identifie la fonction $f(z) = \ln z - z$ et $\tau = n$. La condition (1.223) situe l'emplacement du col à $z_0 = 1$. De plus, $f''(z_0) = -1$, soit $e^{i\pi}$. En vertu de (1.230), l'angle d'approche optimal est alors $\psi = 0$, ce qui revient à une intégration le long de l'axe réel. La substitution dans (1.232) donne la valeur approchée

$$\Gamma(1+n) \approx \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}, \quad (1.235)$$

connue sous le nom de formule de Stirling.

2

Équations différentielles

2.1 Quelques équations de la physique des milieux continus

On se propose dans cette section d'introduire quelques équations de la physique des milieux continus. Ces équations se retrouvent dans divers domaines de la physique allant de la physique ondulatoire, à l'électromagnétisme en passant par la mécanique quantique.

2.1.1 Équation d'onde

Considérons le problème de la corde vibrante de la figure 2.1, correspondant à un milieu linéaire modulable d'amplitude ψ selon la direction y ($[\psi]$ = distance). L'analyse des forces sur un segment de masse ΔM et de longueur Δx de la corde montre que la force nette $F_y(t)$ selon y au temps t est donnée par

$$F_y(t) = T_2 \sin \theta_2 - T_1 \sin \theta_1 \quad (2.1)$$

avec $T_{1,2}$ le module de la force $\mathbf{T}_{1,2}$ en $x = x_{1,2}$. On peut récrire cette expression sous la forme

$$\begin{aligned} F_y(t) &= T_2 \tan \theta_2 \cos \theta_2 - T_1 \tan \theta_1 \cos \theta_1 \\ &= T_2 \cos \theta_2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{x_2=x_1+\Delta x} - T_1 \cos \theta_1 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{x_1} \\ &= T_0 \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{x_2=x_1+\Delta x} - \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{x_1} \right], \end{aligned} \quad (2.2)$$

où T_0 est la tension d'équilibre. Dans la limite $\Delta x \rightarrow 0$, on trouve à l'aide la définition de la dérivée (seconde) et de la deuxième loi de Newton,

$$F_y(t) = \rho_0 \Delta x \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = T_0 \Delta x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (2.3)$$

où nous avons introduit la densité de masse linéaire ρ_0 . L'expression prend finalement la forme de l'équation d'onde unidimensionnelle

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2} - v^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = 0} \quad (2.4)$$

où $v = \sqrt{T_0/\rho_0}$ est une grandeur caractéristique ayant les dimensions de vitesse. Sa généralisation à trois dimensions est immédiate et permet d'écrire

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - v^2 \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) = 0.} \quad (2.5)$$

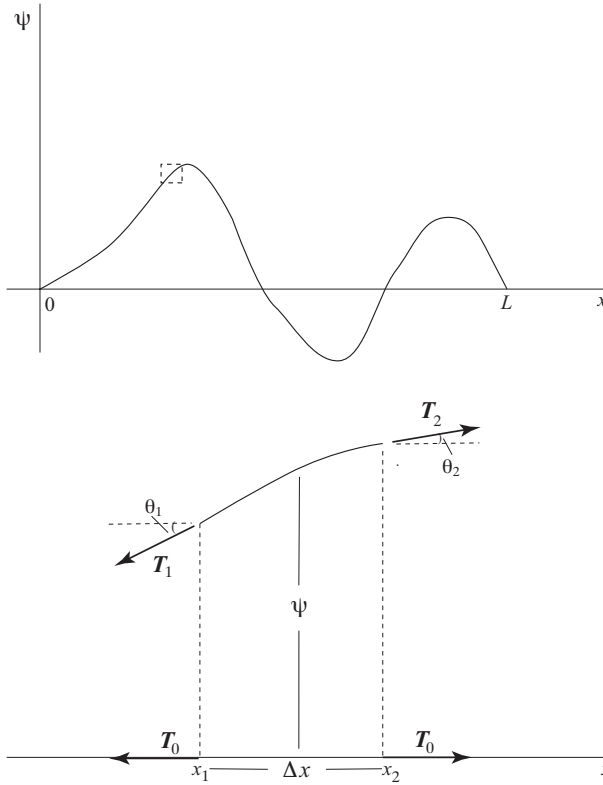


FIGURE 2.1

a) Corde vibrante à une dimension ; b) Zoom d'un segment de la corde avec l'analyse des forces.

2.1.2 Équations de l'électromagnétisme

La propagation d'une onde électromagnétique obéit à une équation similaire à l'équation d'onde (2.5). Pour le montrer, considérons les équations de Maxwell qui sont à la base de l'électromagnétisme classique pour des champs électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ ¹ :

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = (4\pi\rho), \quad (2.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.7)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.8)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \epsilon \frac{\mu}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 4\pi\sigma \frac{\mu}{c} \mathbf{E}, \quad (2.9)$$

1. Unités CGS.

2.1. Quelques équations de la physique des milieux continus

où c est la vitesse de la lumière dans le vide, ϵ , la constante diélectrique, μ , la perméabilité magnétique, σ , la conductivité, et la condition $(4\pi\rho)$ pour (2.6) s'applique en présence d'une densité de charge $\rho(\mathbf{r}) \neq 0$. Dans un premier temps, comme le champ électrique est conservatif, il dérive d'un potentiel électrostatique $\Phi(\mathbf{r})$, à savoir

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

À partir de l'équation de Maxwell pour le champ électrique, on obtient dans un premier temps l'équation de Laplace (Poisson) pour le potentiel :

$$\boxed{\nabla^2\Phi = 0(-4\pi\rho)}. \quad (2.11)$$

Maintenant, en prenant le rotationnel de l'équation (2.8), liée à l'induction, on trouve

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0, \\ \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Si on se place dans la situation où il n'y pas de densité de charge, $\rho = 0$, et on tire à partir de (2.6) et (2.9)

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon\mu \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - 4\pi\sigma \frac{\mu}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0} \quad (2.13)$$

qui a la forme de l'équation d'onde (2.5) pour la partie électrique du champ électromagnétique avec toutefois un terme supplémentaire 'd'amortissement' de l'onde électromagnétique. Ce terme est le résultat d'une conductivité électrique finie σ du milieu. Dans le vide, ce terme est strictement nul.

De même pour la partie magnétique de l'onde, l'application du rotationnel à l'équation (2.9) et l'utilisation de (2.8) permettent d'écrire

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} - \epsilon \frac{\mu}{c} \nabla \times \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - 4\pi\sigma \frac{\mu}{c} \nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (2.14)$$

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B} + \epsilon \frac{\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} + 4\pi\sigma \frac{\mu}{c^2} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0. \quad (2.15)$$

Ainsi en absence de monopole magnétique [éq. (2.7)], on trouve

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{B} - \epsilon\mu \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} - 4\pi\sigma \frac{\mu}{c^2} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0,} \quad (2.16)$$

pour l'équation de la partie magnétique de l'onde électromagnétique.

Finalement, le champ magnétique est lié au potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ par la relation $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, ce qui à partir de (2.9) donne

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} - \epsilon \frac{\mu}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= 4\pi\sigma \frac{\mu}{c} \mathbf{E}, \\ \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} - \epsilon \frac{\mu}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= 4\pi\sigma \frac{\mu}{c} \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Comme le champ magnétique \mathbf{B} est défini 'à un terme de jauge près' pour \mathbf{A} , le choix de jauge permet de satisfaire l'égalité $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. D'autre part, le champ électrique est relié au vecteur potentiel via l'expression $\mathbf{E} = -(1/c)\partial\mathbf{A}/\partial t$, ce qui permet d'obtenir

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{A} - \epsilon\mu \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - 4\pi\sigma \frac{\mu}{c^2} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = 0,} \quad (2.18)$$

qui est l'équation d'onde pour le vecteur potentiel.

2.1.3 Équation de diffusion

L'équation de diffusion est une autre équation importante de la physique ; elle intervient dans de nombreuses situations comme la propagation de la fumée dans l'air, d'une substance dissoute dans un solvant, des porteurs de charges dans les matériaux en présence de collisions, etc. Pour la mettre en forme, considérons la loi de Fick,

$$\mathbf{J} = -D\nabla\rho \quad (2.19)$$

qui relie la densité de courant \mathbf{J} (nombre de particules traversant une unité de surface par unité de temps) à la densité $\rho(\mathbf{r})$ par l'intermédiaire de la *constante de diffusion* D ($[D] = \text{cm}^2/\text{sec}$). Si les particules sont régies par la loi de conservation stipulant que la variation du nombre de particules dans un volume V en fonction du temps est égale au nombre de particules traversant sa surface, alors \mathbf{J} et ρ sont reliées par l'équation de continuité,

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (2.20)$$

Il en découle immédiatement,

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} = D\nabla^2\rho,} \quad (2.21)$$

qui est l'équation de diffusion.

On peut généraliser cette équation au cas où la substance peut être soit émise ou détruite. L'équation de continuité prend alors la forme inhomogène

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = s, \quad (2.22)$$

où $s(\mathbf{r})$ est la 'source' ou le 'drain' de particules. L'équation de diffusion devient alors inhomogène,

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} = D\nabla^2\rho + s.} \quad (2.23)$$

Conduction de chaleur

La conduction de chaleur procède également par le mécanisme de diffusion. En fait, le courant d'énergie (chaleur) est proportionnel au gradient de la température $T(\mathbf{r}, t)$, via la relation de Fourier,

$$\mathbf{J} = -\kappa\nabla T, \quad (2.24)$$

où κ est la *conductivité thermique* ($[\kappa] = \text{calorie}/\text{cm}\cdot\text{sec}\cdot\text{degré}$). Considérons la quantité de chaleur (Q) entrante dans un volume V par unité de temps, soit

$$-\oint \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} = \frac{\Delta Q}{\Delta t}. \quad (2.25)$$

À l'aide de la définition de la chaleur spécifique en thermodynamique, $C = dQ/dT$, on peut écrire à l'aide du théorème de la divergence

$$\begin{aligned} -\oint \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} &= -\int \nabla \cdot \mathbf{J} dV \\ &= C \int \rho \frac{\Delta T}{\Delta t} dV. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Le volume étant arbitraire, on tire dans la limite $\Delta t \rightarrow 0$,

$$-\nabla \cdot \mathbf{J} = \rho C \frac{\Delta T}{\Delta t} \rightarrow \rho C \frac{\partial T}{\partial t}.$$

À l'aide de la relation de Fourier (2.24), nous avons

$$\boxed{\frac{\rho C}{\kappa} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T,} \quad (2.27)$$

qui est l'équation de diffusion de la chaleur.

2.1.4 Équation de Schrödinger

L'hypothèse confirmée des ondes de matière pour chaque particule soulève obligatoirement la question de l'existence d'une équation d'onde. Cette équation doit en retour aussi permettre de retrouver la physique corpusculaire comme cas limite que l'on sait valable à l'échelle macroscopique. À l'intérieur d'une série de quatre articles dès plus remarquables et certainement parmi les plus influents que l'histoire des sciences ait connue, E. Schrödinger montra en 1926 qu'une telle équation peut être déduite de celle régissant la propagation d'ondes en physique ondulatoire et de la dualité onde-corpuscule². De là naissait véritablement la *mécanique quantique* telle qu'elle est connue actuellement³.

Pour simplifier l'écriture, nous prendrons le cas unidimensionnel pour lequel l'équation d'onde pour un champ scalaire $\psi(x, t)$ supposé uniévalué, est donnée par

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0. \quad (2.28)$$

On montre facilement par séparation de variables que $\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$, où $\omega = 2\pi\nu$ est la pulsation de l'onde, est aussi solution de l'équation à condition que :

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{4\pi^2 \nu^2}{v^2} \varphi = 0. \quad (2.29)$$

Maintenant, si l'on fait intervenir la dualité onde-corpuscule grâce à la relation de de Broglie entre l'impulsion et la longueur d'onde :

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2m[E - V]} \\ &= \frac{h}{\lambda}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

où E, V et λ sont respectivement l'énergie totale, l'énergie potentielle et la longueur d'onde de la particule. Sachant que pour une onde, on doit avoir $\lambda = v/\nu$, nous pouvons écrire l'équation d'onde sous la forme :

$$\begin{aligned} H\varphi &= E\varphi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V\varphi &= E\varphi \end{aligned} \quad (2.31)$$

qui apparaît dès lors comme une équation aux valeurs propres d'énergie lorsqu'on associe à $E = \hbar\omega$, l'énergie d'un état stationnaire et à H , la notion d'opérateur Hamiltonien. Schrödinger élimina E à l'aide de la relation $\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, de sorte que la généralisation immédiate de (2.31) à trois dimensions s'écrit :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}} \quad (2.32)$$

2. Il est pertinent de rappeler ici que dans l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique, l'aspect ondulatoire de ψ est lié à une onde de probabilité (Max Born, 1926).

3. Il s'agit ici de la mécanique quantique non relativiste.

et qui est connue sous le nom *d'équation de Schrödinger*. Schrödinger *postula* que cette équation demeure valable pour un potentiel $V = V(\mathbf{r}, t)$ dépendant explicitement de l'espace et du temps.⁴

Schrödinger appliqua cette équation au cas de l'atome d'hydrogène et reproduisit les résultats du modèle de Bohr. Dans la même série d'articles, il solutionna avec succès cette équation pour le rotateur rigide, le rotateur vibrationnel (molécule diatomique), ainsi que l'oscillateur linéaire. Il retrouva dans ce dernier cas les résultats de Heisenberg.⁵ Cette équation est à la base des développements spectaculaires qu'ont connus par la suite la physique atomique, la physique du solide et dans une certaine mesure la physique nucléaire.

2.2 Équations différentielles du second ordre à coefficients non constants : solutions sous forme de série

Les équations différentielles de la physique introduites ci-dessus peuvent être ramenées à une ou plusieurs équations de la forme

$$\mathcal{L}\psi = 0, \quad (2.33)$$

où \mathcal{L} est l'opérateur linéaire différentiel

$$\frac{d^2}{dx^2} + p(x)\frac{d}{dx} + q(x) = 0, \quad (2.34)$$

ce qui donne l'équation différentielle linéaire homogène

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + p(x)\frac{d\psi}{dx} + q(x)\psi = 0. \quad (2.35)$$

Dans le cas non homogène, nous avons

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + p(x)\frac{d\psi}{dx} + q(x)\psi = \rho(x), \quad (2.36)$$

où $\rho(x)$ est une fonction de x . Lorsque $p(x)$, $q(x)$ sont des constantes, nous retombons sur le cas des équations différentielles à coefficients constants qui a déjà été traité dans les cours précédents. Cependant dans le cas où ces fonctions ne sont pas constantes, $\mathcal{L}\psi = 0[\rho(x)]$ n'admet pas en général de solutions sous forme de fonctions élémentaires (trigonométriques, exponentielle, logarithmique, etc.). On envisage alors des solutions sous forme de séries, c'est la méthode des séries.

Si on regarde l'équation homogène (2.35), il y a deux solutions indépendantes que l'on peut noter ψ_1 et ψ_2 . La linéarité de l'opérateur différentielle \mathcal{L} permet d'écrire

$$\psi(x) = a\psi_1(x) + b\psi_2(x). \quad (2.37)$$

En présence d'un terme non homogène $\rho(x)$, il y a aussi une solution particulière que l'on notera $\psi_p(x)$. Maintenant puisque $\mathcal{L}\psi = 0$ pour la partie homogène, il découle que l'on peut ajouter n'importe quelle combinaison linéaire des solutions de la partie homogène à la solution particulière du cas non homogène, ce qui donne au total une autre solution $\Psi = a\psi + b\psi_p$.

La solution générale de l'équation homogène $\mathcal{L}\psi = 0$ possèdera des pôles là où $p(x)$ et $q(x)$ en possèdent et sera régulière là où ces deux fonctions sont régulières. Nous serons amenés à considérer les deux cas suivants :

- i) Points réguliers où $p(x)$ et $q(x)$ sont analytiques en ces points ;
- ii) Points singuliers où $p(x)$ et $q(x)$ présentent des singularités sous la forme de pôles.

Dans ce qui suit, nous analyserons distinctement chaque cas.

4. Équation de Schrödinger dépendante du temps.

5. Ces résultats étaient basés sur la formulation dite 'matricielle' de la mécanique quantique développée au même moment par W. Heisenberg, M. Born et P. Jordan (1925-1926).

2.2.1 Solutions en séries : points réguliers

Si pour l'équation homogène (2.35), les fonctions $p(x)$ et $q(x)$ sont analytiques en $x = a$, nous avons vu qu'elles admettent un développement de Taylor autour de ce point :

$$\begin{aligned} p(x) &= p(a) + p'(a)(x-a) + \frac{1}{2!}p''(a)(x-a)^2 + \dots, \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}p^{(n)}(a)(x-a)^n, \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} q(x) &= q(a) + q'(a)(x-a) + \frac{1}{2!}q''(a)(x-a)^2 + \dots, \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}q^{(n)}(a)(x-a)^n. \end{aligned} \quad (2.39)$$

On montre que la solution possédera aussi un développement de la forme

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi^{(n)}(a)(x-a)^n, \quad (2.40)$$

où nous avons absorbé le facteur $\frac{1}{n!}$ dans une redéfinition de $\psi^{(n)}(a)$. En effet, la substitution de (2.40) dans l'équation homogène (2.35) permet d'écrire

$$\begin{aligned} &\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)\psi^{(n)}(a)(x-a)^{n-2} + \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{m!}p^{(m)}(a)\psi^{(n)}(a)(x-a)^{m+n-1} \\ &+ \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{m!}q^{(m)}(a)\psi^{(n)}(a)(x-a)^{m+n} = 0. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Le coefficient total de chaque puissance doit s'annuler pour satisfaire cette équation. Il est commode d'effectuer les translations $n-2 \rightarrow n$ et $n-1 \rightarrow n$ de l'indice n pour les deux premiers termes et obtenir

$$\begin{aligned} &\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)\psi^{(n+2)}(a)(x-a)^n + \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{m!}p^{(m)}(a)\psi^{(n+1)}(a)(x-a)^{m+n} \\ &+ \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{m!}q^{(m)}(a)\psi^{(n)}(a)(x-a)^{m+n} = 0. \end{aligned} \quad (2.42)$$

L'annulation successive du coefficient de chaque puissance donne les relations

$$\begin{aligned} 2\psi^{(2)}(a) + p(a)\psi^{(1)}(a) + q(a)\psi(a) &= 0, \\ 6\psi^{(3)}(a) + 2p(a)\psi^{(2)}(a) + p^{(1)}(a)\psi^{(1)}(a) + \psi(a)q^{(1)}(a) + \psi^{(1)}(a)q(a) &= 0, \\ \dots & \end{aligned} \quad (2.43)$$

qui lient entre eux les coefficients de la série de ψ . Maintenant comme la solution est généralement de la forme $\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2$ où ψ_1 est indépendante de ψ_2 , alors on peut poser pour la première solution $\psi(a) = 1$ et $\psi'(a) = 0$, et (2.43) conduit à

$$\begin{aligned} \psi^{(2)}(a) &= -\frac{1}{2}q(a), \\ \psi^{(3)}(a) &= \frac{1}{6}p(a)q(a) - \frac{1}{6}q^{(1)}(a), \\ &\dots \end{aligned} \quad (2.44)$$

Ainsi la première solution devient

$$\psi_1(x) = 1 - \frac{1}{2!}q(a)(x-a)^2 + \frac{1}{3!}(p(a)q(a) - q^{(1)}(a))(x-a)^3 + \dots, \quad (2.45)$$

qui est bien de la forme d'un développement de Taylor (2.40).

Pour la deuxième solution indépendante, on peut poser $\psi(a) = 0$ et $\psi'(a) = 1$, et on trouve de manière analogue

$$\begin{aligned} \psi^{(2)}(a) &= -\frac{1}{2}p(a), \\ \psi^{(3)}(a) &= \frac{1}{6}(p^2(a) - p^{(1)}(a) - q(a)), \\ &\dots \end{aligned} \quad (2.46)$$

d'où l'on tire

$$\psi_2(x) = (x-a) - \frac{1}{2!}p(a)(x-a)^2 + \frac{1}{3!}(p^2(a) - p^{(1)}(a) - q(a))(x-a)^3 + \dots. \quad (2.47)$$

Ces solutions sont valables à l'intérieur d'un rayon de convergence $R = |x_0 - a|$ où x_0 est la première singularité rencontrée pour l'équation différentielle. On pourrait démontrer de manière rigoureuse que ce rayon de convergence coïncide avec celui des séries de $p(x)$ et $q(x)$ en (2.38).

Oscillateur harmonique linéaire quantique et équation d'Hermite

Dans ce qui suit, nous allons illustrer la méthode des séries dans le cas de l'équation de Schrödinger de l'oscillateur harmonique linéaire ou unidimensionnel. On considère ainsi une particule de masse m soumise à un potentiel harmonique de la forme $V(x) = \frac{1}{2}\kappa x^2$ où κ est la constante de ressort. En représentation position, l'équation de Schrödinger pour ce problème prend la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}\kappa x^2 \psi = E\psi, \quad (2.48)$$

où E est l'énergie indépendante de la position. Cette équation peut s'écrire sous la forme d'une équation homogène (2.35)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)\psi = 0, \quad (2.49)$$

où nous avons introduit la fréquence naturelle de l'oscillateur, à savoir $\omega = \sqrt{\kappa/m}$. Il est commode de travailler à l'aide de la variable réduite sans dimension $\bar{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$. L'équation de Schrödinger devient alors

$$\frac{d^2\psi}{d\bar{x}^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \bar{x}^2\right)\psi = 0 \quad (2.50)$$

ou de manière équivalente

$$\frac{d^2\psi}{d\bar{x}^2} + (2p + 1 - \bar{x}^2)\psi = 0, \quad (2.51)$$

où par commodité pour la suite, nous avons défini

$$2E/\hbar\omega \equiv 2p + 1, \quad (2.52)$$

où p est une constante sans dimension.

Il est utile dans un premier temps d'analyser le comportement de cette équation dans la limite des grandes distances où $|\bar{x}| \rightarrow \infty$. Dans cette limite, les termes constants deviennent négligeables et l'équation se réduit à

$$\frac{d^2\psi}{d\bar{x}^2} \rightarrow \bar{x}^2\psi, \quad (2.53)$$

2.2. Équations différentielles du second ordre à coefficients non constants : solutions sous forme de série

pour laquelle on vérifie sans difficulté que $\psi(\bar{x}) \sim e^{\pm\bar{x}^2/2}$ sont des solutions acceptables. Cependant la forme $\psi \sim e^{+\bar{x}^2/2}$ doit être éliminée puisque la fonction d'onde solution croît indéfiniment à l'infini. Elle n'est pas de carré sommable et ne peut représenter un état de l'espace de Hilbert. Nous la laisserons tomber dans ce qui suit. Pour la solution restante, nous poserons pour tout \bar{x} une solution de la forme

$$\psi(\bar{x}) = y(\bar{x})e^{-\bar{x}^2/2}. \quad (2.54)$$

où $y(\bar{x})$ est une fonction interpolant la fonction d'onde des grandes distances jusqu'à l'origine. En substituant dans (2.51), la partie gaussienne peut être éliminée de part et d'autre de l'équation et on obtient alors une équation homogène pour y :

$$\frac{d^2y}{d\bar{x}^2} - 2\bar{x}\frac{dy}{d\bar{x}} + 2py = 0, \quad (2.55)$$

qui est l'équation d'Hermite⁶. C'est aussi un équation homogène à point régulier, en particulier en $\bar{x} = 0$. Elle n'admet donc pas de solution à l'aide de fonctions élémentaires, mais sous forme de série entière que l'on posera de la forme

$$y(\bar{x}) = \bar{x}^\ell \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} \bar{x}^{2n}. \quad (2.56)$$

Ici nous avons extrait la plus petite puissance \bar{x}^ℓ où ℓ est un entier positif et par hypothèse $a_0 \neq 0$. Cette forme nous est dictée par une propriété fort importante de l'opérateur hamiltonien

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\kappa x^2 \quad (2.57)$$

de l'équation de Schrödinger (2.51) qui est en fait invariant sous l'opération de parité $\bar{x} \rightarrow -\bar{x}$, ce qui implique que la fonction d'onde solution $\psi(\bar{x})$ a une parité bien définie : $\psi(\bar{x})$ est soit paire ou impaire lorsque $\bar{x} \rightarrow -\bar{x}$. Dans le cas pair, $\psi(-\bar{x}) = \psi(\bar{x})$, alors que dans le cas impair, $\psi(-\bar{x}) = -\psi(\bar{x})$. Or comme la partie gaussienne (2.54) de la solution est obligatoirement paire, $y(\bar{x})$ aura donc une parité bien définie. Ainsi, pour ℓ pair (impair), y et donc ψ sera paire (impaire).

À l'instar de l'approche générale développée à la section précédente, la substitution de (2.56) dans l'équation d'Hermite nous permet d'écrire

$$\sum_{n=-1}^{\infty} a_{2n+2}(2n+2+\ell)(2n+\ell+1)\bar{x}^{2n+\ell} + \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n}[-2(2n+\ell)+2p]\bar{x}^{2n+\ell} = 0 \quad (2.58)$$

La somme des coefficients de chaque puissance $\bar{x}^{2n+\ell}$ doit s'annuler. Ainsi les coefficients pour les termes $n = 0, 1, \dots$ présents dans les deux sommations sont alors liés par la *relation de récurrence* :

$$a_{2n+2} = \frac{2(2n+\ell)-2p}{(2n+2+\ell)(2n+\ell+1)} a_{2n}. \quad (2.59)$$

Le terme $n = -1$ est présent que dans la première sommation. Son coefficient doit être nul et si $a_0 \neq 0$, nous pouvons extraire la condition sur ℓ , à savoir

$$\ell(\ell-1) = 0. \quad (2.60)$$

Il s'ensuit que $\ell = 0$ ou encore $\ell = 1$. Selon (2.56) et (2.54), on conclut alors que la fonction d'onde ψ sera paire pour $\ell = 0$ et impaire pour $\ell = 1$.

Comme $y(\bar{x})$ est en fait une série infinie, nous ne sommes pas assurés de l'appartenance de la fonction d'onde à l'espace de Hilbert physique qui ne contient que des fonctions d'onde de carré sommable. Il faut vérifier que la

6. Charles Hermite, mathématicien français (1822-1901), il a supervisé des mathématiciens célèbres comme Borel et Poincaré. On lui doit la découverte des formes hermitiennes en théorie des nombres, les matrices orthogonales et hermitiques, l'analyse de solutions du cinquième degré par les fonctions elliptiques, etc. .

Chapitre 2. Équations différentielles

croissance de la série infinie de y avec \bar{x} ne compense pas la décroissance gaussienne dans (2.54). En d'autres termes, la solution physique doit vérifier la condition

$$\lim_{|\bar{x}| \rightarrow \infty} \frac{y}{e^{\bar{x}^2/2}} \rightarrow 0. \quad (2.61)$$

Dans le cas pair $\ell = 0$ (la démonstration est similaire pour le cas impair $\ell = 1$), nous allons démontrer que la condition (2.61) est satisfaite *si et seulement si* la série $y(\bar{x})$ contient un *nombre fini* de termes avec $p = 0, 2, 4, \dots$.

On regarde dans un premier temps l'implication suivante : si $p = 0, 2, 4, \dots$ alors (2.61) est satisfaite. Pour $\ell = 0$, la relation de récurrence (2.59) devient

$$a_{2n+2} = \frac{4n - 2p}{(2n + 2)(2n + 1)} a_{2n}. \quad (2.62)$$

Ainsi pour $p = 0, 2, 4, \dots$, nous avons $a_{p+2} = 0$ et la série est tronquée et devient un polynôme de degré p :

$$y(\bar{x}) = a_0 + a_2 \bar{x}^2 + \dots + a_p \bar{x}^p, \quad (2.63)$$

appelé *polynôme d'Hermite*. La puissance du polynôme étant finie, elle ne peut compenser l'effet de la gaussienne et la condition (2.61) est alors satisfaite.

Pour la seconde partie – et seulement si – de la double implication, cela revient à montrer que si $p \neq 0, 2, 4, \dots$, alors (2.61) n'est pas satisfaite. On constate selon (2.62) que lorsque $p \neq 0, 2, 4, \dots$, la série (2.56) n'est manifestement pas tronquée et possède une infinité de termes. Dans ce cas, si on considère le quotient des séries de puissance de (2.61),

$$\frac{y(\bar{x})}{e^{\bar{x}^2/2}} = \frac{a_0 + a_2 \bar{x}^2 + a_4 \bar{x}^4 + \dots + a_{2n} \bar{x}^{2n} + \dots}{b_0 + b_2 \bar{x}^2 + b_4 \bar{x}^4 + \dots + b_{2n} \bar{x}^{2n} + \dots}, \quad (2.64)$$

où $b_{2n} = 1/(2^n n!)$, il suffit de montrer que $a_{2n} > b_{2n}$ quand n est très grand pour que (2.61) ne soit pas satisfaite. À l'aide de (2.62), nous avons dans la limite $n \gg 1$ et $n \gg p$,

$$\frac{a_{2n+2}/a_{2n}}{b_{2n+2}/b_{2n}} = -\frac{4(p - 2n)(n + 1)}{(2n + 2)(2n + 1)} \rightarrow 2. \quad (2.65)$$

Les coefficients de la série pour la fonction $y(\bar{x})$ croissent donc plus vite que ceux de la gaussienne, de sorte que l'on pourra toujours trouver un n suffisamment grand pour que $a_{2n} > b_{2n}$ et ainsi violer la condition (2.61), ce qui complète la démonstration.

On en conclut que pour $\ell = 0$, la fonction $y(\bar{x})$, pour les valeurs possibles de $p = 0, 2, 4, \dots$, est un polynôme d'Hermite de degré p . Le rapport $2E/\hbar\omega = 2p + 1$ conduit donc à la *quantification de l'énergie* pour l'oscillateur harmonique linéaire :

$$E \rightarrow E_p = \hbar\omega \left(p + \frac{1}{2} \right). \quad (2.66)$$

Une démonstration similaire pour $\ell = 1$ conduit aux valeurs de $p = 1, 3, 5, \dots$.

Les fonctions d'onde (2.54) sont définies à une constante près que l'on peut choisir de manière à ce que $|\psi_p|^2$ soit normalisée, à savoir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_p(x)|^2 dx = 1. \quad (2.67)$$

Les solutions normalisées appartiennent alors à l'espace de Hilbert physique et peuvent être écrites sous la forme

$$\psi_p(\bar{x}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^p p!}} e^{-\bar{x}^2/2} H_p(\bar{x}), \quad (2.68)$$

2.2. Équations différentielles du second ordre à coefficients non constants : solutions sous forme de série

où dans la notation standard, $H_p(\bar{x})$ est le polynôme d'Hermite de degré p . La formule de Rodriguès

$$H_p(\bar{x}) = (-1)^p e^{\bar{x}^2} \frac{d^p}{d\bar{x}^p} e^{-\bar{x}^2}. \quad (2.69)$$

permet de générer les polynômes d'Hermite de degré p . En voici quelques exemples :

$$\begin{aligned} H_0(\bar{x}) &= 1, \\ H_1(\bar{x}) &= 2\bar{x}, \\ H_2(\bar{x}) &= 4\bar{x}^2 - 2, \\ H_3(\bar{x}) &= 8\bar{x}^3 - 12\bar{x}, \\ &\dots \end{aligned} \quad (2.70)$$

Le tracé de quelques polynômes d'Hermite est donné à la figure 2.2. Ces polynômes représentent en fait un

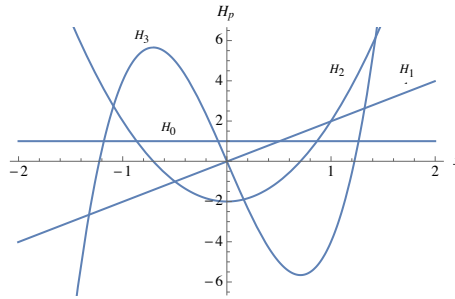


FIGURE 2.2
Tracé des quatre premiers polynômes d'Hermite.

ensemble de polynômes orthogonaux. On peut le voir à partir de l'équation de Schrödinger pour les fonctions d'onde états stationnaires ψ_p :

$$\frac{d^2\psi_p}{d\bar{x}^2} + [(2p+1) - \bar{x}^2]\psi_p = 0. \quad (2.71)$$

En multipliant respectivement par ψ_m et ψ_n cette équation, on obtient deux équations dont la soustraction pour $p = n$ et $p = m$ conduit à :

$$\frac{d}{d\bar{x}} [\psi_m \psi_n' - \psi_m' \psi_n] = 2(n-m)\psi_n \psi_m. \quad (2.72)$$

L'intégration sur x de part et d'autre sur tout l'intervalle permet d'écrire

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} [\psi_m \psi_n' - \psi_m' \psi_n] \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 2(n-m) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx. \quad (2.73)$$

La partie gauche de cette équation s'annule aux bornes en raison du carré sommable des fonctions d'onde. On obtient ainsi la relation d'orthonormalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}, \quad (2.74)$$

où pour $n = m$, la normalisation (2.68) a été prise en compte. À l'aide de la forme explicite des fonctions d'onde (2.68), cette relation peut aussi s'écrire en termes de la variable réduite \bar{x} :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{x}^2} H_m(\bar{x}) H_n(\bar{x}) d\bar{x} = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}. \quad (2.75)$$

Cette relation d'orthogonalité est celle des polynômes d'Hermite. Ces fonctions appartiennent à la catégorie des *fonctions spéciales* et constituent dans le cas présent un ensemble de fonctions orthogonales pour lesquelles le facteur gaussien e^{-x^2} de l'intégrande est appelé fonction poids. Nous reviendrons en plus grand détail sur les fonctions orthogonales dans le cadre du problème de Sturm-Liouville (§ 2.3).

2.2.2 Recherche d'une seconde solution : méthode du Wronskien

Dans la recherche de solutions linéairement indépendantes à l'équation $\mathcal{L}\psi = 0$ en (2.35), nous sommes souvent limités par la méthode des séries à une seule solution. L'obtention d'une deuxième solution linéairement indépendante à partir de la première solution est néanmoins possible par l'intermédiaire d'un objet mathématique appelé le *Wronskien*⁷.

Si ψ_1 et ψ_2 sont deux solutions de $\mathcal{L}\psi = 0$, on définit le Wronskien par l'expression

$$\Delta(x) = \psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1'. \quad (2.76)$$

On vérifie que lorsque les solutions sont linéairement dépendantes à savoir, $\psi_1 = a\psi_2$ et $\psi_1' = a\psi_2'$, le Wronskien s'annule, soit $\Delta(\psi_1, \psi_2) = 0$. À l'inverse, si les solutions sont linéairement indépendantes alors $\Delta(\psi_1, \psi_2) \neq 0$. On peut alors se servir de cette propriété pour déduire une seconde solution à partir de la première.

À l'aide de $\mathcal{L}\psi_{1,2} = 0$, on montre aisément que le Wronskien obéit à l'équation

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta}{dx} &= \psi_1(x)\psi_2''(x) - \psi_1''(x)\psi_2(x) \\ &= -\psi_1(p(x)\psi_2'(x) + q(x)\psi_2(x)) + (p(x)\psi_1'(x) + q(x)\psi_1(x))\psi_2(x) \\ &= -p(x)\Delta(x). \end{aligned} \quad (2.77)$$

Si nous définissons une fonction $f(x)$ telle que

$$p(x) = \frac{d}{dx} \ln f(x), \quad (2.78)$$

alors

$$\frac{d\Delta}{\Delta} = -\frac{df}{f}, \quad (2.79)$$

ce qui permet une intégration immédiate,

$$\Delta(x) = \Delta(x_0) \exp\left(-\int_{x_0}^x p(x)dx\right). \quad (2.80)$$

On en conclut que si le Wronskien est non nul en x_0 , il le sera également en x . D'autre part, la définition (2.76) peut être réécrite sous la forme

$$\frac{\Delta(x)}{\psi_1^2(x)} = \frac{d}{dx} \left(\frac{\psi_2(x)}{\psi_1(x)} \right), \quad (2.81)$$

ce qui après intégration et selon (2.80) conduit à

$$\psi_2(x) = \Delta(x_0)\psi_1(x) \int \frac{\exp\left(-\int_{x_0}^x p(\omega)d\omega\right)}{\psi_1^2(x)} dx. \quad (2.82)$$

7. Hoene Wronski (1778-1853), mathématicien d'origine polonaise connu pour sa personnalité fantasque. La méthode du Wronskien a été sa seule contribution d'importance en carrière.

2.2. Équations différentielles du second ordre à coefficients non constants : solutions sous forme de série

Comme les solutions sont connues à une constante près, celle-ci peut être redéfinie de manière à absorber la constante d'intégration et obtenir en définitive

$$\psi_2(x) = B\psi_1(x) \int \frac{\exp\left(-\int p(x)dx\right)}{\psi_1^2(x)} dx \quad (2.83)$$

où B est une constante. Cette relation permet donc de déterminer une deuxième solution à l'aide de la première solution ψ_1 et de la donnée de $p(x)$.

2.2.3 Équations à points réguliers singuliers, équation indicelle

Le point $x = a$ est appelé *point singulier* de l'équation $\mathcal{L}\psi = 0$,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + p(x)\frac{d\psi}{dx} + q(x)\psi(x) = 0, \quad (2.84)$$

si une ou l'autre des fonctions $p(x)$ et $q(x)$, voire même les deux ne sont pas analytiques en ce point. Dans ce cas, la méthode des séries telle que présentée précédemment ne s'applique pas. Cependant, dans beaucoup d'applications, les points singuliers ne donnent pas lieu à des non analyticités sévères, de sorte que de simples modifications de la méthode des séries permettent d'obtenir des solutions satisfaisantes à l'aide de la *méthode des séries de Frobenius*.

Dans ces cas, nous sommes amenés à définir des *points réguliers singuliers* lorsque

$$(x-a)p(x) \quad \text{et} \quad (x-a)^2q(x) \quad (2.85)$$

sont des fonctions analytiques en $x = a$. En d'autres termes, $p(x)$ a tout au plus un pôle simple, alors que la singularité de $q(x)$ se limitera à un pôle double.

Exemple 2.1 :

Soit l'équation de Legendre

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2x}{1-x^2} \frac{d\psi}{dx} + \frac{p(p+1)}{1-x^2} \psi(x) = 0 \quad (2.86)$$

où p est une constante. Cette équation est de la forme (2.84) avec l'identification $p(x) = -2x/(1-x^2)$ et $q(x) = p(p+1)/(1-x^2)$. On vérifie toute de suite qu'en $x = \pm 1$, les fonctions $p(x)$ et $q(x)$ sont singulières. Les singularités sont des pôles simples et donc, $x = \pm 1$ sont des points réguliers singuliers de l'équation de Legendre.

Les solutions que nous cherchons autour des points réguliers singuliers de $\mathcal{L}\psi = 0$ seront de la forme d'une *série de Frobenius* :

$$\psi(x) = (x-a)^s \sum_{n=0}^{\infty} b_n (x-a)^n, \quad (2.87)$$

où s est un exposant pouvant prendre des valeurs entières, fractionnaires, ou irrationnelles. On peut montrer qu'il existe au moins une et parfois deux solutions de ce type autour du point régulier singulier a .

L'existence d'une telle solution peut être motivée à l'aide d'un exemple simple qui illustre clairement l'ensemble de la méthode. Considérons en effet l'équation d'Euler

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{p}{x} \frac{d\psi}{dx} + \frac{q}{x^2} \psi(x) = 0. \quad (2.88)$$

où p et q sont des constantes non nulles. On constate d'emblée que $x = 0$ est un point régulier singulier. Les solutions peuvent être trouvées rapidement par le simple changement de variable $z = \ln x$ pour $x > 0$. L'équation devient

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + (p-1)\frac{d\psi}{dz} + q\psi(z) = 0 \quad (2.89)$$

qui a la forme d'une équation différentielle du second ordre avec coefficients constants. Par la méthode habituelle, on peut poser une solution sous forme exponentielle $\psi = e^{sz}$ qui, une fois substituée, conduit à l'équation auxiliaire

$$s^2 + (p-1)s + q = 0. \quad (2.90)$$

Cette équation du second degré admet les deux racines $s_{1,2} = -\frac{1}{2}(p-1) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(p-1)^2 - 4q}$. Lorsque les deux racines sont distinctes ($s_1 \neq s_2$), nous obtenons deux solutions en puissances de x :

$$\psi_1(x) \sim x^{s_1}, \quad \psi_2(x) \sim x^{s_2} \quad (2.91)$$

Lorsque $s_1 = s_2$, nous sommes limités à une seule solution. La méthode du Wronskien permet cependant de trouver une seconde solution linéairement indépendante. En utilisant (2.83), on trouve rapidement $\psi_2 \sim \psi_1(z)z$, ce qui donne, en fonction de x , les deux solutions

$$\psi_1(x) \sim x^{s_1}, \quad \psi_2(x) \sim (\ln x)x^{s_1}. \quad (2.92)$$

On vérifie que dans cet exemple simple de l'équation d'Euler, les deux solutions pour $s_1 \neq s_2$ sont bien de la forme d'une série Fröbenius (2.87) avec $b_0 \neq 0$ et $b_{1,\dots} = 0$, alors que pour $s_1 = s_2$, il n'y a qu'une seule série de Fröbenius alors l'autre solution admet une correction logarithmique.

Séries de Fröbenius : formulation générale

Si on revient à la forme $\mathcal{L}\psi = 0$ plus générale (2.84) avec un point régulier singulier en $x = a$, on cherche à trouver les relations de récurrence pour les coefficients b_n de la série, ou le cas échéant, des deux séries de Fröbenius. Débutons en considérant les fonctions $(x-a)p(x)$ et $(x-a)^2q(x)$ analytiques, alors on peut écrire

$$\begin{aligned} p(x) &= \frac{1}{x-a}(x-a)p(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} p_n(x-a)^{n-1}, \end{aligned} \quad (2.93)$$

et

$$\begin{aligned} q(x) &= \frac{1}{(x-a)^2}(x-a)^2q(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} q_n(x-a)^{n-2}, \end{aligned} \quad (2.94)$$

où $p_n \equiv 1/n!d^n[(x-a)p]/dx^n|_{x=a}$ et $q_n \equiv 1/n!d^n[(x-a)^2q]/dx^n|_{x=a}$. En supposant une solution de la forme (2.87), on trouve successivement

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (x-a)^{s-2} \sum_{n=0}^{\infty} b_n(n+s)(n+s-1)(x-a)^n, \quad (2.95)$$

$$p(x)\frac{d\psi}{dx} = (x-a)^{s-2} \sum_{n=0}^{\infty} p_n \sum_{k=0}^{\infty} b_k(k+s)(x-a)^{k+n}, \quad (2.96)$$

$$q(x)\psi(x) = (x-a)^{s-2} \sum_{n=0}^{\infty} q_n \sum_{k=0}^{\infty} b_k(x-a)^{k+n}. \quad (2.97)$$

2.2. Équations différentielles du second ordre à coefficients non constants : solutions sous forme de série

La substitution dans $\mathcal{L}\psi = 0$ conduit à l'annulation des puissances successives de $x - a$ de la série :

$$(x - a)^0 f(s) b_0 = 0 \quad (2.98)$$

$$(x - a)^1 [b_1 f(s + 1) + b_0(p_1 s + q_1)] = 0 \quad (2.99)$$

⋮

$$(x - a)^n [b_n f(s + n) + b_0(s p_n + q_n) + \dots + b_{n-1}((s + n - 1)p_1 + q_1)] = 0, \quad (2.100)$$

où pour la puissance 0, nous avons défini

$$\boxed{f(s) \equiv s(s - 1) + p_0 s + q_0} \quad (2.101)$$

appelée *équation indicelle* – analogue de l'équation auxiliaire (2.90) trouvée dans le cadre de l'équation d'Euler. Quadratique en s , elle donne deux racines (exposants) distinctes ou confondues à l'équation $f(s_{1,2}) = 0$ et donc aux solutions en série de Fröbenius :

$$s_{1,2} = -\frac{1}{2}(p_0 - 1) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(p_0 - 1)^2 - 4q_0} \quad (2.102)$$

Lorsque $s_1 \neq s_2$, nous pourrions être tentés de croire qu'elle donne lieu systématiquement à deux solutions en série de Fröbenius. C'est effectivement le cas si s_1 et s_2 ne sont pas des entiers distincts, mais lorsque $s_1 - s_2 = m \geq 1$ avec m entier, alors une seule solution en série de Fröbenius associée à s_1 existe. Dans ce cas, on vérifie en effet que pour la deuxième solution liée à s_2 , nous avons pour un certain n , $b_n f(s_2 + n) = b_n f(s_1 - m + n)$, qui coïncide avec $b_n f(s_1) = 0$ lorsque $n = m$. Il s'ensuit que les coefficients b_n, b_{n+1}, \dots de la seconde série ne peuvent pas être calculés au-dessus d'une certaine puissance, ce qui conduit à une indétermination.

Dans ce cas et évidemment aussi lorsque $s_1 = s_2$, la recherche d'une seconde solution peut se faire à l'aide du Wronksien. Nous aurons selon (2.83) une deuxième solution de la forme $\psi_2(\bar{x}) = v(\bar{x})\psi_1(\bar{x})$, avec

$$v(\bar{x}) = \int \frac{e^{-\int p(\bar{x})d\bar{x}}}{\psi_1^2(\bar{x})} d\bar{x}, \quad (2.103)$$

où nous avons posé $x - a \rightarrow \bar{x}$ pour alléger l'écriture. Regardons dans un premier temps $v'(\bar{x})$, nous aurons à l'aide de développements en série de $p(\bar{x})$ et $\psi_1(\bar{x})$ en (2.93) et (2.87) :

$$\begin{aligned} v'(x) &= \frac{e^{-\int p(\bar{x})d\bar{x}}}{\psi_1^2(\bar{x})} \\ &= \frac{e^{-\int (\frac{p_0}{\bar{x}} + p_1 + \dots)d\bar{x}}}{\bar{x}^{2s_1} (b_0 + b_1 \bar{x} + \dots)^2} \\ &= \frac{e^{-p_1 \bar{x} - \dots}}{\bar{x}^k (b_0 + b_1 \bar{x} + \dots)^2} \\ &\equiv \frac{1}{\bar{x}^k} g(\bar{x}), \end{aligned} \quad (2.104)$$

où nous avons défini $k = 2s_1 + p_0$ et introduit $g(\bar{x})$ comme fonction qui est analytique en $\bar{x} = 0$ avec $g(0) = b_0^{-2}$. Si on admet que k est entier⁸, on peut exprimer $g(\bar{x})$ sous la forme d'un développement de Taylor,

$$g(\bar{x}) = g_0 + g_1 \bar{x} + g_2 \bar{x}^2 + \dots \quad (2.105)$$

8. Dans le cas de racines confondues de l'équation indicelle (2.101), $s_1 = s_2$, ce qui conduit à $s_1 = \frac{1}{2}(1 - p_0)$, et donne $k = 2s_1 + p_0 = 1$ qui est entier. Si les racines diffèrent d'un entier soit, $s_1 - s_2 = m$, l'équation indicelle (2.101), qui peut être réécrite sous la forme $(s - s_1)(s - s_2) = s^2 - s(s_1 + s_2) + s_1 s_2 = 0$, conduit après identification à $s_1 + s_2 = 1 - p_0$. Ainsi, $k = 2s_1 + p_0 = 2s_1 + 1 - s_1 - s_2 = m + 1$, qui est aussi entier.

Nous aurons dans un premier temps pour $v(\bar{x})$:

$$\begin{aligned} v(\bar{x}) &= \int (g_0 \bar{x}^{-k} + g_1 \bar{x}^{-k+1} + \dots + g_{k-1} \bar{x}^{-1} + g_k + \dots) d\bar{x} \\ &= g_0 \frac{\bar{x}^{-k+1}}{-k+1} + g_1 \frac{\bar{x}^{-k+2}}{-k+2} + \dots + g_{k-1} \ln \bar{x} + g_k \bar{x} + \dots \end{aligned} \quad (2.106)$$

Maintenant en isolant le terme logarithmique pour la solution $\psi_2 = v\psi_1$, celle-ci pourra s'écrire

$$\begin{aligned} \psi_2(\bar{x}) &= g_{k-1} \psi_1(\bar{x}) \ln \bar{x} + \bar{x}^{s_1} (b_0 + b_1 \bar{x} + \dots) \left(g_0 \frac{\bar{x}^{-k+1}}{-k+1} + g_1 \frac{\bar{x}^{-k+2}}{-k+2} + \dots + g_k \bar{x} + \dots \right) \\ &= g_{k-1} \psi_1(\bar{x}) \ln \bar{x} + \bar{x}^{s_1-k+1} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \bar{x}^n. \end{aligned} \quad (2.107)$$

Selon les racines de l'équation indicelle, on peut écrire, $s_1 - k + 1 = -s_1 - p_0 + 1 = s_2$, alors la seconde solution prend finalement la forme

$$\psi_2(x) = \psi_1(x) \ln(x-a) + (x-a)^{s_2} \sum_{n=0}^{\infty} c_n (x-a)^n, \quad (2.108)$$

où les coefficients c_n sont obtenus par substitution dans $\mathcal{L}\psi_2 = 0$.

Équation de Bessel En guise d'exemple à la méthode de Frobenius, nous allons considérer l'équation de Bessel d'ordre p :

$$x^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} + x \frac{d\psi}{dx} + (x^2 - p^2) \psi(x) = 0. \quad (2.109)$$

Cette équation peut être réécrite sous la forme (2.84),

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d\psi}{dx} + \frac{x^2 - p^2}{x^2} \psi(x) = 0. \quad (2.110)$$

Il s'ensuit que $xp(x) = 1$ et $x^2q(x) = x^2 - p^2$ sont analytiques en $x = 0$ qui est un point régulier singulier.

Nous avons selon (2.93) et (2.94) :

$$p(x) = \frac{1}{x} = \frac{p_0}{x} \quad (2.111)$$

$$q(x) = \frac{1}{x^2} (x^2 - p^2) = \frac{1}{x^2} (q_0 + q_2 x^2) \quad (2.112)$$

avec $p_0 = 1$, $q_0 = -p^2$ et $q_2 = 1$. L'équation indicelle devient

$$f(s) = s^2 - p^2 = 0, \quad (2.113)$$

laquelle admet comme racines $s_{1,2} = \pm p$.

$p \neq 0, 1, 2, \dots$: Si $s_1 - s_2 = 2p$ n'est pas un entier (le cas où s_1 et s_2 sont demi-entiers sera traité séparément), nous avons donc deux séries de Frobenius comme solutions. La première à $s_1 = p$ est de la forme

$$J_p(x) = x^p \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n. \quad (2.114)$$

2.2. Équations différentielles du second ordre à coefficients non constants : solutions sous forme de série

La relation de récurrence pour les b_n s'obtient aisément à partir de (2.100) qui se réduit à l'expression

$$b_n f(p+n) + b_{n-2} q_2 = 0 \rightarrow b_n = -\frac{b_{n-2}}{n(2p+n)}. \quad (2.115)$$

On constate dès lors que si $b_{-1} = 0$ pour la série de Frobenius, alors $b_3 = b_5 = \dots = 0$ et il n'y a pas de termes impairs dans la série. Comme $b_0 \neq 0$, on trouve successivement

$$b_2 = -\frac{b_0}{2 \cdot 2(p+1)}, \quad b_4 = +\frac{b_0}{2 \cdot 2^4(p+1)(p+2)}, \quad b_6 = -\frac{b_0}{2 \cdot 3 \cdot 2^6(p+1)(p+2)(p+3)}, \dots \quad (2.116)$$

La solution (2.191) prend la forme :

$$J_p(x) = b_0 x^p \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{x^{2n}}{(p+1) \dots (p+n)} \quad (2.117)$$

Il est coutume de prendre $b_0 = 1/(2^p \Gamma(p+1))$, ce qui permet d'écrire

$$J_p(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{(x/2)^{2n+p}}{\Gamma(p+n+1)} \quad (2.118)$$

qui est appelée *fonction de Bessel de première espèce*.

La deuxième solution ne pose pas de difficulté. En posant $p \rightarrow -p$ dans (2.115), on trouve

$$J_{-p}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{(x/2)^{2n-p}}{\Gamma(-p+n+1)}. \quad (2.119)$$

Il est cependant d'usage de prendre comme deuxième solution la combinaison linéaire suivante :

$$Y_p(x) = \frac{J_p(x) \cos p\pi - J_{-p}(x)}{\sin p\pi}, \quad (2.120)$$

pour laquelle on ajoute J_p qui est aussi solution. Y_p est appelée *fonction de Bessel de seconde espèce*, également appelée *fonction de Neumann*. La solution générale est alors,

$$\psi(x) = AJ_p(x) + BY_p(x). \quad (2.121)$$

$p = 0, 1, 2, \dots$: Si maintenant p est entier, alors $s_1 - s_2 = 2p$ est aussi entier, ce qui nous limite à une seule solution de type Frobenius soit $J_p(x)$. À partir de (2.118), on trouve les premières fonctions de Bessel avec $p \geq 0$:

$$J_0(x) = 1 - \frac{x^2}{4} + \frac{x^4}{64} - \frac{x^6}{2304} + \dots, \quad (2.122)$$

$$J_1(x) = \frac{x}{2} - \frac{x^3}{16} + \frac{x^5}{384} - \frac{x^7}{18432} + \dots, \quad (2.123)$$

$$J_2(x) = \frac{x^2}{8} - \frac{x^4}{96} + \frac{x^6}{3072} - \frac{x^8}{184320} + \dots \quad (2.124)$$

Le tracé des premières fonctions de Bessel est donné à la figure 2.3. Ces fonctions oscillent en fonction de x avec une enveloppe qui décroît en $\sim 1/\sqrt{x}$ pour x grand et toutes les valeurs de p .

En ce qui concerne la deuxième solution, on vérifie que (2.119) n'est pas une solution puisque si $|\Gamma(-p+n+1)| = \infty$ pour $-p+n+1 \leq 0$, la série (2.119) pour $J_{-p}(x)$ peut débuter à $n = p$ sans rien changer. En posant $n' = n - p$, on trouve

$$J_{-p}(x) = \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n'+p}}{n'!} \frac{(x/2)^{2n'+p}}{\Gamma(n'+p+1)} = (-1)^p J_p(x), \quad (2.125)$$

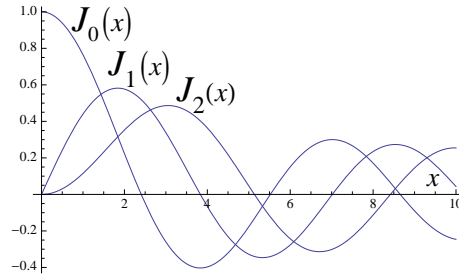


FIGURE 2.3

Tracé des trois premières fonctions (orthogonales) de Bessel de première espèce J_0 , J_1 et J_2 .

qui est bien linéairement dépendante de J_p et ne peut être considérée comme solution. Une deuxième solution peut être trouvée à l'aide du Wronskien comme en (2.108), laquelle, bien que légitime, s'avère assez fastidieuse à obtenir suite à l'intégration terme par terme menant à $\{b_n\}$. Il est d'usage de procéder autrement en généralisant la forme de Neumann (2.120) pour des entiers p . On utilise la limite

$$Y_p(x) = \lim_{n \rightarrow p} \frac{J_n(x) \cos n\pi - J_{-n}(x)}{\sin n\pi}, \quad (2.126)$$

La règle de l'Hôpital donne l'expression

$$Y_p(x) = \frac{2}{\pi} (\ln(x/2) + \gamma) J_p(x) - \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{p-1} \frac{(p-n-1)!}{n!} (x/2)^{2n-p} - \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (\Phi(n) + \Phi(p+n)) \frac{(x/2)^{2n+p}}{n!(n+p)!}, \quad (2.127)$$

où $\Phi(p) = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{p}$ [$\Phi(0) = 0$] et $\gamma = 0,577\dots$ est la constante d'Euler. On reconnaît la partie logarithmique de (2.108). Le terme supplémentaire en $(2\gamma/\pi)J_p$, nécessairement solution, est ajouté par convention.

$p = \frac{1}{2}, \dots$ Dans ce dernier paragraphe, nous allons considérer le cas où p est demi-entier. Ainsi, la première solution en série de Frobenius pour $s_1 = \frac{1}{2}$ est obtenue directement à partir de (2.118) :

$$J_{\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{x}{2}} \left[\frac{1}{\Gamma(1 + \frac{1}{2})} - \frac{x^2}{4 \cdot \Gamma(2 + \frac{1}{2})} + \frac{x^4}{2 \cdot 2^4 \cdot \Gamma(3 + \frac{1}{2})} + \dots \right] \quad (2.128)$$

Comme

$$\Gamma(m + \frac{1}{2}) = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)}{2^m} \sqrt{\pi}, \quad (2.129)$$

il vient

$$\begin{aligned} J_{\frac{1}{2}}(x) &= \sqrt{\frac{x}{2}} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{x^2}{2 \cdot 3} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{x^4}{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5} + \dots \right] \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \dots \right] = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x, \end{aligned} \quad (2.130)$$

2.2. Équations différentielles du second ordre à coefficients non constants : solutions sous forme de série

qui est essentiellement un produit de fonctions élémentaires ; ce qui suggère d'utiliser la méthode du Wronskien pour obtenir la deuxième solution, soit

$$\begin{aligned} J_{-\frac{1}{2}}(x) &= BJ_{\frac{1}{2}} \int \frac{dx}{xJ_{\frac{1}{2}}^2(x)} = -B \frac{\pi}{2} J_{\frac{1}{2}}(x) \cot x \\ &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x \end{aligned} \quad (2.131)$$

où nous avons ajusté la constante multiplicative pour obtenir le coefficient habituellement utilisé. L'expression de la deuxième solution aurait pu être obtenue directement par la relation de récurrence (2.115), en posant $p = -\frac{1}{2}$ et une fois de plus, $a_1 = a_3 = \dots = 0$ et ce, en dépit du fait que $s_1 - s_2 = 1$, est un entier.

Les relations de récurrence entre fonctions de Bessel peuvent ensuite être utilisées pour l'obtention de $J_{\pm 3/2}, \dots$, aux autres valeurs de p demi-entières.

Équation hypergéométrique de Gauss

La célèbre équation de Gauss est donnée par

$$x(1-x) \frac{d^2\psi}{dx^2} + [c - (a+b+1)x] \frac{d\psi}{dx} - ab\psi = 0, \quad (2.132)$$

où a , b et c sont des constantes. Comme nous le verrons, cette équation admet des solutions valables dans une grande variété de situations. Si on la compare à la forme générique $\mathcal{L}\psi = 0$ en (2.84), on constate immédiatement qu'elle possède deux points réguliers singuliers en $x = 0$ et $x = 1$.

Considérons dans un premier temps la forme des solutions en série de Fröbenius (2.87) autour de $x = 0$. Au voisinage de ce point, nous pouvons écrire pour $p(x)$ et $q(x)$:

$$\begin{aligned} xp(x) &= \frac{c - (a+b+1)x}{1-x} \\ &= [c - (a+b+1)x](1+x+x^2+\dots) \\ &= c + [c - (a+b+1)]x + [c - (a+b+1)]x^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.133)$$

et

$$\begin{aligned} x^2q(x) &= -\frac{ab}{1-x}x \\ &= -abx(1+x+x^2+\dots) \\ &= -abx - abx^2 - abx^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.134)$$

En comparant avec (2.93) et (2.94), ces équations donnent les valeurs des coefficients $p_0 = c$, $p_1 = p_2 = \dots = c - (a+b+1)$ et $q_0 = 0$ et $q_1 = q_2 = \dots = -ab$. Pour l'équation de Gauss, l'équation indiciale (2.101) prend alors la forme $f(s) = s(s-1) + sc$, ce qui donne $s_1 = 0$ et $s_2 = 1 - c$ comme racines à $f(s) = 0$. Si on se place dans le cas où $1 - c$ n'est pas un entier, nous aurons deux solutions en série de Fröbenius.

Chapitre 2. Équations différentielles

Prenons le cas $s_1 = 0$, les formules de récurrence (2.98-2.100) permettent d'établir

$$\begin{aligned}
 b_1 f(1) + b_0 q_1 = 0 &\rightarrow b_1 = b_0 \frac{ab}{c} \\
 b_2 f(2) + p_1 b_1 + q_2 b_0 + q_1 b_1 = 0 &\rightarrow b_2 = b_0 \frac{a(a+1)b(b+1)}{2!c(c+1)} \\
 b_3 f(3) + b_0 q_3 + b_1(p_2 + q_2) + b_2(2p_1 + q_1) = 0 &\rightarrow b_3 = b_0 \frac{a(a+1)(a+2)b(b+1)(b+2)}{3!c(c+1)(c+2)} \\
 &\vdots \\
 b_n f(n) + b_0 q_n + \dots + b_{n-1}((n-1)p_1 + q_1) = 0 &\rightarrow b_n = b_0 \frac{a(a+1)\dots(a+n-1)b(b+1)\dots(b+n-1)}{n!c(c+1)\dots(c+n-1)}.
 \end{aligned} \tag{2.135}$$

La première solution devient alors

$$\psi_1(x) = b_0 \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{a(a+1)\dots(a+n-1)b(b+1)\dots(b+n-1)}{c(c+1)\dots(c+n-1)} x^n \right] \tag{2.136}$$

$$\equiv b_0 F(a, b, c, x), \tag{2.137}$$

où $F(a, b, c, x)$ est appelée *série hypergéométrique*. Cette fonction peut être vue comme la généralisation de la progression géométrique. On constate en effet que pour le cas particulier $a = 1$ et $c = b$,

$$F(1, b, b, x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} x^n \rightarrow \frac{1}{1-x}. \tag{2.138}$$

Plus généralement, on vérifie que si a ou b est un nombre entier *négatif*, la série est tronquée et $F(a, b, c, x)$ est alors un polynôme. Plusieurs équations différentielles à points réguliers singuliers peuvent ainsi être vues comme des cas particuliers de la fonction hypergéométrique (équations de Chebyshev, Legendre, etc.). Si c n'est pas un nombre négatif, F est analytique et converge pour $|x| < 1$. Comme $p(x)$ et $q(x)$ ont toutes deux des pôles simples, la grande majorité des équations avec ce type de singularités peuvent être reliées à la fonction hypergéométrique.

Dans la recherche d'une deuxième solution on considère le cas où $s_2 = 1 - c$ n'est pas un entier. La solution de type Fröbenius sera de la forme

$$\begin{aligned}
 \psi_2(x) &= x^{1-c} \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \\
 &\equiv x^{1-c} \phi(x).
 \end{aligned} \tag{2.139}$$

Une simple substitution dans l'équation de Gauss (2.132) permet après quelques manipulations d'écrire une équation différentielle pour ϕ , à savoir

$$x(1-x) \frac{d^2 \phi}{dx^2} + \{(2-c) - [(a-c+1) + (b-c+1) + 1]x\} \frac{d\phi}{dx} - (a-c+1)(b-c+1)\phi = 0 \tag{2.140}$$

qui a aussi la forme d'une équation de Gauss (2.132) avec le dictionnaire de correspondance $c \leftrightarrow 2 - c$, $a \leftrightarrow a - c + 1$ et $b \leftrightarrow b - c + 1$. La deuxième solution devient alors

$$\psi_2(x) = x^{1-c} F(a - c + 1, b - c + 1, 2 - c, x). \tag{2.141}$$

La solution générale pour $|x| < 1$ est en définitive

$$\psi(x) = c_1 F(a, b, c, x) + c_2 x^{1-c} F(a - c + 1, b - c + 1, 2 - c, x). \tag{2.142}$$

Équation hypergéométrique confluyente

On considère de nouveau l'équation hypergéométrique :

$$z(1-z)\psi'' + [c - (1+a+b)z]\psi' - ab\psi = 0$$

qui possède comme nous l'avons vu ci-dessus des points réguliers singuliers en $z = 0$ et $z = 1$. Dans plusieurs problèmes physiques, on est amené à considérer une seule singularité à l'origine, comme c'est le cas pour le potentiel coulombien d'une charge à l'origine de l'atome d'hydrogène (voir § 2.3.5). On cherche alors à pousser la singularité en $z = 1$ à l'infini de manière à obtenir une équation décrivant une seule singularité à l'origine. Pour y parvenir, on constate dans un premier temps que lorsque nous effectuons un changement d'échelle de la variable z , soit $x = bz$, l'équation hypergéométrique devient

$$\psi'' + \left[\frac{c}{x} + \frac{(1+a+b-c)}{x-b} \right] \psi' + \frac{ab}{x(x-b)} \psi = 0 \quad (2.143)$$

En posant maintenant $b \rightarrow \infty$, on obtient

$$x\psi'' + (c-x)\psi' - a\psi = 0 \quad (2.144)$$

qui est l'équation *hypergéométrique confluyente*. Ici 'confluent' signifie que la singularité en $x = b$ fusionne avec celle en $x = \infty$ lorsque la limite $b \rightarrow \infty$ est prise.

Les exposants des solutions en série de Fröbenius sont donnés par 0 et $1 - c$. Si c n'est pas égal à zéro ou à un entier négatif, la solution pour l'exposant 0 est de la forme

$$\begin{aligned} \psi(x) &= b_0 \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a(1+a)\cdots(n-1+a)}{n! c(1+c)\cdots(n-1+c)} x^n \right] \\ &\equiv b_0 \Phi(a, c, x) \end{aligned} \quad (2.145)$$

où $\Phi(a, c, x)$ est appelée *fonction hypergéométrique confluyente* et b_0 est une constante. On vérifie que si a est un entier négatif, alors Φ devient un polynôme.

2.3 Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

Dans la solution d'une équation différentielle, nous sommes fréquemment amenés à chercher une solution devant satisfaire des *conditions aux limites* bien précises. Les conditions aux limites se distinguent des *conditions initiales* en ce que la solution doit prendre des valeurs précises en différents points, ligne, surface, etc. Les conditions initiales, quant à elles, se bornent à spécifier la valeur de la solution et/ou de sa dérivée en un point donné. Le problème posé par les conditions aux limites est intimement lié à celui des *fonctions et valeurs propres* d'un opérateur différentiel tel que \mathcal{L} .

2.3.1 Corde vibrante

En guise d'introduction au problème des valeurs propres et fonctions propres dans la solution d'une équation différentielle du second ordre, considérons le cas simple de l'équation d'onde pour le cas d'une corde vibrante. Son équation a déjà été introduite et est de la forme

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (2.146)$$

Nous cherchons une solution satisfaisant les conditions aux limites aux extrémités, soit $\psi(0, t) = 0$ et $\psi(a, t) = 0$. Les conditions initiales sont $\psi'(x, t = 0) = 0$ et $\psi(x, 0) = f(x)$. Ainsi, les conditions aux limites fixent les deux extrémités de la corde en $x = 0$ et $x = a$, alors que les conditions initiales stipulent que la corde est immobile $t = 0$ avec une déformation initiale décrite par la fonction continue $f(x)$.

Nous allons chercher une solution par la méthode de *séparation de variables*. Ainsi, posons la forme séparable $\psi(x, t) = \varphi(x)\chi(t)$, laquelle par substitution dans (2.146) conduit à

$$\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} = \frac{1}{v^2} \frac{\chi''(t)}{\chi(t)}. \quad (2.147)$$

La partie gauche (droite) de l'équation étant une fonction uniquement x (t), on peut alors l'assimiler à une *constante de séparation* que l'on notera $-\lambda$. On obtient alors les deux équations différentielles indépendantes

$$\varphi''(x) + \lambda \varphi(x) = 0 \quad (2.148)$$

$$\chi''(t) + \lambda v^2 \chi(t) = 0. \quad (2.149)$$

La solution à chacune des équations est bien connue. Considérons dans un premier temps la partie spatiale, pour laquelle nous avons

$$\varphi(x) = c_1 \sin \sqrt{\lambda} x + c_2 \cos \sqrt{\lambda} x. \quad (2.150)$$

Cette solution est soumise aux conditions aux limites $\varphi(0) = 0$ et $\varphi(a) = 0$. La première condition impose $c_2 = 0$, alors que pour la seconde, on doit avoir $\sin \sqrt{\lambda} a = 0$, ce qui implique que λ doit satisfaire

$$\sqrt{\lambda} \rightarrow \sqrt{\lambda_n} a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.151)$$

où $n = 0$ correspondant à la solution triviale, $\varphi = 0$, est exclue. On affecte ainsi les solutions $\varphi(x) \rightarrow \varphi_n(x)$ de l'indice discret n .

De même, la solution de la partie temporelle est donnée par

$$\chi_n(t) = a_1 \sin(v \sqrt{\lambda_n} t) + a_2 \cos(v \sqrt{\lambda_n} t), \quad (2.152)$$

pour laquelle les conditions initiales conduisent à $\chi'_n(0) \propto a_1 = 0$, et donc, $\chi_n(t) \sim \cos(n\pi vt/a)$. Les solutions admissibles à la corde vibrante satisfaisant aux conditions limites et initiales deviennent

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \varphi_n(x)\chi_n(t), \\ &= \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}vt\right). \end{aligned} \quad (2.153)$$

Ces dernières étant linéairement indépendantes, la solution générale prend la forme

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}vt\right). \quad (2.154)$$

On en déduit également que la configuration de la corde $f(x)$ à $t = 0$, est également une superposition des φ_n de la forme

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (2.155)$$

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

Les fonctions $\varphi_n = \sin n\pi x/a$, solutions de la partie spatiale de l'équation d'onde, sont appelées *fonctions propres* et les λ_n correspondantes sont les *valeurs propres*. La solution $\psi(x)$ admet alors un *développement sur les fonctions propres* φ_n .

Maintenant, si les fonctions propres φ_n et φ_m satisfont l'équation de la partie spatiale $\varphi_i'' = -\lambda_i \varphi_i$ de l'équation d'onde, en multipliant par φ_m et φ_n pour $i = n$ et m respectivement, on trouve par soustraction

$$\begin{aligned}\varphi_m \varphi_n'' - \varphi_n \varphi_m'' &= (\lambda_m - \lambda_n) \varphi_n \varphi_m \\ (\varphi_m \varphi_n' - \varphi_n \varphi_m')' &= (\lambda_m - \lambda_n) \varphi_n \varphi_m,\end{aligned}\quad (2.156)$$

ce qui, par intégration sur l'intervalle $[0, a]$ conduit à

$$\begin{aligned}\int_0^a (\varphi_m \varphi_n' - \varphi_n \varphi_m') dx &= (\lambda_m - \lambda_n) \int_0^a \varphi_n \varphi_m dx \\ [\varphi_m \varphi_n' - \varphi_n \varphi_m'] \Big|_0^a &= (\lambda_m - \lambda_n) \int_0^a \varphi_n \varphi_m dx \\ 0 &= (\lambda_m - \lambda_n) \int_0^a \varphi_n \varphi_m dx,\end{aligned}\quad (2.157)$$

où la dernière ligne est une conséquence des conditions aux limites. Il découle que pour des valeurs propres différentes $\lambda_n \neq \lambda_m$, les φ_n et φ_m satisfont à la *relation d'orthogonalisation* :

$$\begin{aligned}\int_0^a \varphi_n(x) \varphi_m(x) dx &= 0, \quad \lambda_n \neq \lambda_m \\ \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) dx &= 0.\end{aligned}\quad (2.158)$$

Pour $n = m$, nous aurons

$$\begin{aligned}\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx &= \frac{1}{2} \int_0^a \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right) dx \\ &= \frac{a}{2}.\end{aligned}\quad (2.159)$$

De plus, la projection de $\psi(x)$ sur la fonction propre φ_n permet de déterminer les coefficients c_n du développement. En effet, en utilisant (2.155) pour $\psi(x) = f(x)$, nous obtenons

$$\begin{aligned}\int_0^a \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx &= \int_0^a \left(c_1 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) + c_2 \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \dots\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= c_n \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= c_n \frac{a}{2},\end{aligned}\quad (2.160)$$

et finalement

$$c_n = \frac{2}{a} \int_0^a \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx, \quad (2.161)$$

qui est la relation d'Euler pour les *composantes de Fourier*.

2.3.2 Formulation générale du problème de Sturm-Liouville

On se propose dans ce paragraphe de généraliser l'approche exposée ci-dessus. C'est le problème de *Sturm-Liouville* que l'on pourra appliquer à un grand nombre de situations. Considérons l'opérateur *auto-adjoint* ou *hermitique*

$$L \equiv \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} \right) - q(x) \quad (2.162)$$

à l'aide duquel on introduit l'équation aux valeurs propres λ :

$$L\psi(x) = -\lambda w(x)\psi(x), \quad (2.163)$$

aussi appelée *équation de Sturm-Liouville*. Ici $p(x)$ et $q(x)$ sont des fonctions de x (à ne pas confondre avec celles introduites en (2.35)), et $w(x)$ est appelée 'fonction poids'. L'équation Sturm-Liouville se présente sous différentes formes. Elle peut par exemple découler de l'équation suivante

$$f(x)\psi''(x) + g(x)\psi'(x) + (h_1(x) + \lambda h_2(x))\psi(x) = 0, \quad (2.164)$$

en substituant les relations

$$p(x) = \exp \left[\int \frac{g(x)}{f(x)} dx \right], \quad (2.165)$$

$$q(x) = -p(x) \frac{h_1(x)}{f(x)}, \quad (2.166)$$

$$w(x) = p(x) \frac{h_2(x)}{f(x)}, \quad (2.167)$$

dans l'équation de Sturm-Liouville (2.163). Une autre forme équivalente est donnée par la forme générique $\mathcal{L}\psi = 0$ en (2.35) avec les relations

$$p(x) = \frac{g(x)}{f(x)}, \quad (2.168)$$

$$q(x) = \frac{h_1(x) + \lambda h_2(x)}{f(x)}, \quad (2.169)$$

reliant (2.35) à (2.164).

Opérateurs auto-adjoints ou hermitiques

Dans cet encadré, on se propose d'introduire l'opérateur adjoint associé à l'opérateur différentiel L :

$$L = p(x) \frac{d^2}{dx^2} + p_1(x) \frac{d}{dx} - q(x), \quad (2.170)$$

où $p(x)$, $p_1(x)$ et $q(x)$ sont des fonctions de la variable x . Considérons l'élément de matrice diagonal de l'opérateur L pour la fonction $\psi(x)$ (réelle) sur l'intervalle $[x_1, x_2]$

$$\langle \psi | L | \psi \rangle = \langle \psi | L \psi \rangle = \int_{x_1}^{x_2} \psi [p\psi'' + p_1\psi' - q\psi] dx. \quad (2.171)$$

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

À l'aide de deux intégrations par partie sur le premier terme de l'intégrande et une sur le second, on trouve

$$\langle \psi | L | \psi \rangle = \psi^2(x) [p_1(x) - p'(x)] \Big|_{x_1}^{x_2} + \int_{x_1}^{x_2} \psi [(\psi p)'' - (\psi p_1)' - q\psi] dx \quad (2.172)$$

Si on se place dans la situation particulière où les intégrales des deux expressions précédentes sont égales, on doit avoir

$$\psi(p'' - p_1')\psi + 2\psi(p' - p_1)\psi' = 0 \quad (2.173)$$

ce qui est satisfait pour tout ψ si

$$p' = p_1 \quad (2.174)$$

On constate que cette condition annule automatiquement le premier terme de droite dans (2.172).

À partir de l'intégrande de (2.172), on définit l'opérateur adjoint \bar{L} :

$$\bar{L}\psi = \frac{d^2}{dx^2}(\psi p) - \frac{d}{dx}(\psi p_1) - \psi q \quad (2.175)$$

et l'élément de matrice correspondant sur ψ :

$$\langle \psi | \bar{L} | \psi \rangle \equiv \langle \bar{L}\psi | \psi \rangle = \int_{x_1}^{x_2} \psi [(\psi p)'' - (\psi p_1)' - q\psi] dx \quad (2.176)$$

Maintenant si la condition (2.174) est satisfaite, on vérifie aisément que $\bar{L}\psi = L\psi$ et donc

$$\langle \bar{L}\psi | \psi \rangle = \langle \psi | L\psi \rangle. \quad (2.177)$$

L est alors un opérateur auto-adjoint ($L = \bar{L}$). Dans ce cas, l'expression de L en (2.170) devient

$$L = \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} \right) - q(x) \quad (2.178)$$

qui est celle de l'opérateur de Sturm-Liouville (2.162) qui est donc auto-adjoint^a ou hermitique^b.

a. Cette propriété peut être étendue à plusieurs autres classes d'opérateurs avec des dérivées simples, etc. C'est le cas des observables en mécanique quantique, avec la quantité de mouvement $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla$, le moment cinétique $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$, ...

b. Dans la littérature, il est parfois d'usage de réserver l'appellation d'opérateur auto-adjoint pour des solutions ψ , réelles, alors que le terme hermitique est 'réserve' au cas où les fonctions ψ sont complexes (voir aussi le paragraphe ci-dessous sur les fonctions complexes et opérateurs hermitiques).

La solution de l'équation de Sturm-Liouville sur l'intervalle $[x_1, x_2]$ sera soumise aux conditions aux limites

$$p(x)\psi'(x)\psi(x) \Big|_{x_1} = p(x)\psi'(x)\psi(x) \Big|_{x_2}. \quad (2.179)$$

On peut examiner les conséquences de ces conditions sur les solutions à l'équation de Sturm-Liouville. Pour deux solutions ψ_n et ψ_m à l'équation (2.163) pour les valeurs propres λ_n et λ_m , la multiplication de la première par ψ_m et la deuxième par ψ_n , nous conduit par soustraction à l'expression

$$\frac{d}{dx} (p(x)\psi_n(x)\psi_m'(x) - p(x)\psi_n'(x)\psi_m(x)) \Big|_{x_1}^{x_2} = (\lambda_n - \lambda_m)w(x)\psi_n(x)\psi_m(x), \quad (2.180)$$

laquelle, par intégration sur l'intervalle $[x_1, x_2]$ donnera

$$(p(x)\psi_n(x)\psi_m'(x) - p(x)\psi_n'(x)\psi_m(x)) \Big|_{x_1}^{x_2} = (\lambda_n - \lambda_m) \int_{x_1}^{x_2} w(x)\psi_n(x)\psi_m(x) dx. \quad (2.181)$$

Ainsi les conditions aux limites (2.179) annulent identiquement le terme de gauche de cette équation et pour $\lambda_n \neq \lambda_m$, on peut établir la relation d'orthogonalité

$$\int_{x_1}^{x_2} w(x)\psi_n(x)\psi_m(x) dx = 0, \quad \lambda_n \neq \lambda_m, \quad (2.182)$$

pour les fonctions propres ψ_n et ψ_m .

On distingue différents types de conditions aux limites pouvant satisfaire (2.179) :

- conditions de type *Dirichlet* où $\psi_{m,n}(x_1)$ et $\psi_{m,n}(x_2)$ s'annulent en x_1 et x_2 . La solution de l'équation d'onde pour la corde vibrante telle que donnée au paragraphe précédent appartient à cette catégorie ;
- conditions de type *Neumann* où les dérivées $\psi'_{m,n}(x_1) = \psi'_{m,n}(x_2) = 0$ s'annulent aux bords ;
- conditions mixtes où $\psi_n(x_1) = \psi_m(x_2)$ et $\psi'_m(x_1) = \psi'_m(x_2)$;
- conditions sur $p(x)$ où $p(x_1) = p(x_2) = 0$; etc.

Fonctions complexes et opérateur hermitique Nous avons supposé ci-dessus que les fonctions ψ_n étaient réelles. Il arrive fréquemment, en particulier en mécanique quantique, que nous ayons affaire à des fonctions propres complexes. La formulation de Sturm-Liouville se généralise aisément à ce cas. En effet considérons les équations Sturm-Liouville pour ψ_n et ψ_m^* :

$$L\psi_n = -\lambda_n w(x)\psi_n \quad (2.183)$$

$$\bar{L}\psi_m^* = -\lambda_m^* w(x)\psi_m^* \quad (2.184)$$

Multipliant la première équation par ψ_m^* et la seconde par ψ_n , et en prenant l'intégrale de chaque côté sur l'intervalle $[x_1, x_2]$, nous avons par soustraction :

$$\int_{x_1}^{x_2} \psi_m^* (L\psi_n) dx - \int_{x_1}^{x_2} \psi_n (\bar{L}\psi_m^*) dx = (\lambda_m^* - \lambda_n) \int_{x_1}^{x_2} \psi_m^* \psi_n w(x) dx \quad (2.185)$$

En raison de l'hermiticité de l'opérateur $L = \bar{L}$ [c.f. (2.177)], on trouve après intégration par partie du terme de gauche :

$$[p(x)\psi_m(x)^*\psi'_n(x) - p(x)\psi_n(x)\psi_m^*(x)'] \Big|_{x_1}^{x_2} = (\lambda_m^* - \lambda_n) \int_{x_1}^{x_2} \psi_m^* \psi_n w(x) dx \quad (2.186)$$

qui est l'analogie de (2.181) pour des fonctions complexes. Ainsi pour des conditions limites adéquates, l'annulation du terme de gauche conduit à la relation d'orthonormalité

$$\int_{x_1}^{x_2} \psi_m^* \psi_n w(x) dx = |N|^2 \delta_{nm}. \quad (2.187)$$

Avec ces mêmes conditions aux limites, on établit à partir de (2.185), la relation suivante pour un opérateur hermitique :

$$\int_{x_1}^{x_2} \psi_m^* (L\psi_n) dx = \int_{x_1}^{x_2} \psi_n (\bar{L}\psi_m^*) dx \quad (2.188)$$

De plus pour $n = m$, on doit avoir

$$\lambda_n^* = \lambda_n, \quad (2.189)$$

à savoir que les valeurs propres de l'opérateur L hermitique sont réelles. Il est en ainsi pour tous les opérateurs hermitiques.

2.3.3 Équation de Bessel et conditions aux limites

Comme première application de l'équation de Sturm-Liouville, nous allons considérer l'équation de Bessel

$$x^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} + x \frac{d\psi}{dx} + (x^2 - p^2)\psi = 0. \quad (2.190)$$

où p est une constante. Effectuons dans un premier temps un changement d'échelle de la variable x en posant $x \rightarrow kx$, où k est une constante. L'équation de Bessel devient alors

$$x^2 \frac{d^2 J_p}{dx^2} + x \frac{dJ_p}{dx} + (k^2 x^2 - p^2)J_p = 0. \quad (2.191)$$

où nous avons renommé les solutions $J_p(kx) \equiv \psi(kx)$ dans la notation standard des fonctions – spéciales – de Bessel. La comparaison avec (2.164) permet de faire les correspondances $f(x) = x^2$, $g(x) = x$, $h_1(x) = -p^2$, $h_2(x) = x^2$ et $\lambda = k^2$, ce qui permet d'établir

$$p(x) = \exp \left[\int \frac{dx}{x} \right] = x, \quad (2.192)$$

$$q(x) = \frac{p^2}{x}, \quad (2.193)$$

$$w(x) = x. \quad (2.194)$$

Ainsi, suite à la relation (2.182), nous aurons pour $k_n \neq k_m$ et l'intervalle $[x_1, x_2] \equiv [0, \ell]$,

$$\int_0^\ell x J_p(k_n x) J_p(k_m x) dx = 0, \quad (2.195)$$

qui est la relation d'orthogonalité des fonctions de Bessel.

Pour une valeur de p entier positif, nous avons déjà vu que l'équation indicelle pour (2.190) admet une seule solution en série de Fröbenius $J_p(x)$, appelée fonction de Bessel de première espèce. Les séries de Fröbenius des trois premières fonctions Bessel s'obtiennent à partir de (2.118) :

$$J_0(x) = 1 - \frac{x^2}{4} + \frac{x^4}{64} - \frac{x^6}{2304} + \dots, \quad (2.196)$$

$$J_1(x) = \frac{x}{2} - \frac{x^3}{16} + \frac{x^5}{384} - \frac{x^7}{18432} + \dots, \quad (2.197)$$

$$J_2(x) = \frac{x^2}{8} - \frac{x^4}{96} + \frac{x^6}{3072} - \frac{x^8}{184320} + \dots \quad (2.198)$$

La représentation graphique de quelques J_p est illustrée ci-dessus à la figure 2.3 (§ 2.2.3). En tant que fonctions orthogonales, les fonctions de Bessel peuvent servir de base de développement d'une fonction $\Psi(x)$, solution de (2.190), à savoir

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n J_p(k_n x), \quad (2.199)$$

où les coefficients de Bessel-Fourier pour la série sont donnés par

$$a_n = \frac{\int_0^\ell \Psi(x) x J_p(k_n x) dx}{\int_0^\ell x J_p^2(k_n x) dx}. \quad (2.200)$$

Le dénominateur de cette équation est la normalisation des fonctions de Bessel pour $n = m$; celle-ci dépend des conditions aux limites utilisées. Pour les conditions de Dirichlet, cette normalisation peut être obtenue à l'aide de l'équation initiale (2.190). Lorsque multipliée par $2J'_p$, celle-ci devient

$$\frac{d}{dx} \left(x^2 (J'_p)^2 + k_n^2 x^2 J_p^2 - p^2 J_p^2 \right) = 2k_n^2 x J_p^2, \quad (2.201)$$

ce qui par intégration sur l'intervalle $[0, \ell]$ donne

$$\int_0^\ell x J_p^2(k_n x) dx = \frac{1}{2} \ell^2 [J'_p(k_n \ell)]^2, \quad (2.202)$$

où $J'_p(k_n \ell) = (dJ_p(k_n x)/d(k_n x))_{x=\ell}$. Maintenant à l'aide des développements en série des fonctions de Bessel, on peut établir aisément les relations de récurrence suivantes

$$J_{p+1}(x) + J_{p-1}(x) = 2 \frac{p}{x} J_p(x), \quad (2.203)$$

$$J_{p+1}(x) - J_{p-1}(x) = -2J'_p(x). \quad (2.204)$$

Or en posant $x = k_n \ell$, $J_p(k_n \ell) = 0$, qui est un zéro de la fonction de Bessel selon les conditions aux limites de type Dirichlet, nous avons alors la relation $J_{p+1}(k_n \ell) = -J'_p(k_n \ell)$ et la normalisation pour des conditions devient

$$\int_0^\ell x J_p^2(k_n x) dx = \frac{1}{2} \ell^2 [J_{p+1}(k_n \ell)]^2. \quad (2.205)$$

Vibrations libres d'une membrane circulaire

La description des vibrations d'une membrane circulaire est régie par l'équation d'onde

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}. \quad (2.206)$$

La membrane de rayon a est située dans le plan xy . Comme il n'y a aucune dépendance de ψ selon z dans ce problème bidimensionnel, le passage en coordonnées cylindriques permet de réduire l'équation d'onde à la forme

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}, \quad (2.207)$$

où $\psi(r, \theta, z, t) \equiv \psi(r, \theta, t)$. Le bord de la membrane circulaire est gardé fixe et donne comme condition aux limites $\psi(r = a, \theta, t) = 0$, qui est de type Dirichlet. Les conditions initiales sur le déplacement et la vitesse de la membrane sont données par $\psi(r, \theta, t = 0) = \psi_0(r, \theta)$ et $\partial \psi / \partial t|_{t=0} = v_0(r, \theta)$.

La forme de l'équation (2.207) suggère pour la solution la séparation de variables

$$\psi(r, \theta, t) = R(r)\Theta(\theta)T(t), \quad (2.208)$$

pour ψ posée comme le produit de trois fonctions d'une variable unique. La substitution de ψ dans l'équation d'onde (2.207) permet d'écrire

$$\frac{1}{R\Theta} \left(\Theta \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{\Theta}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{R}{r^2} \frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} \right) = \frac{1}{T} \frac{1}{v^2} \frac{d^2 T}{dt^2}. \quad (2.209)$$

La partie gauche ne dépend que de r et θ et est donc indépendante de t , alors que la partie de droite est uniquement fonction de t . On introduit donc une première constante de séparation λ pour la partie temporelle

$$\frac{d^2 T}{dt^2} = \lambda v^2 T. \quad (2.210)$$

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

Cette équation permet en retour d'écrire pour le couple de variables spatiales r et θ :

$$-\frac{r^2}{R} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} - \lambda R \right) = \frac{1}{\Theta} \frac{d^2 \Theta}{d\theta^2}, \quad (2.211)$$

où maintenant la partie gauche est indépendante de la variable θ et la partie droite, de la variable r . On introduit une seconde constante de séparation notée λ_1 , conduisant à une équation pour θ :

$$\frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} = \lambda_1 \Theta, \quad (2.212)$$

et à l'équation de la partie radiale

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} - \lambda R + \lambda_1 \frac{R}{r^2} = 0. \quad (2.213)$$

On procède tour à tour à la solution des équations pour chacune des variables. Pour la partie temporelle (2.210), nous prendrons $\lambda \leq 0$, puisque pour $\lambda > 0$, la solution pour $T(t)$ serait une exponentielle croissante de la forme $\sim e^{\alpha t}$ avec $\alpha > 0$, qui est non physique. On posera $\lambda \equiv -k^2$ et on définira $\omega^2 \equiv k^2 v^2$, ayant les unités du carré d'une fréquence. L'équation de la partie temporelle devient maintenant

$$\frac{d^2 T}{dt^2} = -\omega^2 T. \quad (2.214)$$

Les solutions peuvent être mises sous la forme d'exponentielles oscillantes

$$T(t) = D e^{-i\omega t} + D^* e^{i\omega t}, \quad (2.215)$$

où D est une constante complexe. Si on passe maintenant à l'équation (2.212) de la partie angulaire, les solutions doivent satisfaire la propriété d'invariance sous rotation de 2π , à savoir $\Theta(\theta + 2\pi) = \Theta(\theta)$. Il s'ensuit que la constante de séparation λ_1 est négative de manière à ce que les solutions soient périodiques avec la période 2π . Si on pose à cet effet $\lambda_1 = -m^2$, les solutions peuvent être écrites sous la forme

$$\Theta_m(\theta) = A_m \cos m\theta + B_m \sin m\theta, \quad (2.216)$$

où $m = 0, 1, 2, \dots$, est un entier positif.

À l'aide des deux constantes de séparation, l'équation radiale devient

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{m^2}{r^2} \right) R = 0, \quad (2.217)$$

qui présente la forme de l'équation de Bessel (2.191). Les solutions sont alors données par

$$R(r) = c_1 J_m(kr) + c_2 N_m(kr), \quad (2.218)$$

où la deuxième solution $N_m(kr)$, dite fonction de Neumann ou fonction de Bessel de seconde espèce obtenue par la méthode du Wronskien, est multiévaluée avec un point branchement à l'origine, ce qui n'est pas acceptable physiquement. Sur cette base, elle n'est pas considérée comme une solution acceptable et doit être retranchée.

Les conditions aux limites s'appliquent sur la partie radiale avec la contrainte $R(r = a) = 0$, ce qui impose en retour

$$J_m(ka \rightarrow \alpha_{m,n}) = 0, \quad (2.219)$$

où $\alpha_{m,n} \equiv k_{m,n} a$ sont les 'zéros' de la fonction de Bessel, soit les valeurs de x pour lesquelles $J_m(x)$ passe par zéro (voir figure 2.3) ; les zéros sont répertoriés par les deux indices discrets m et n , ce qui permet d'introduire les modes propres de la membrane, de fréquences

$$\omega_{m,n} = v k_{m,n} \quad (2.220)$$

Les fonctions propres solutions de l'équation de la membrane circulaire sont données par

$$\psi_{m,n}(r, \theta, t) = R_{m,n}(r)\Theta_m(\theta)T_{m,n}(t), \quad (2.221)$$

$$= J_m(\alpha_{m,n}r/a)(A_m \cos m\theta + B_m \sin m\theta)(D_{m,n}e^{-i\omega_{m,n}t} + D_{m,n}^*e^{i\omega_{m,n}t}). \quad (2.222)$$

La solution totale peut s'écrire comme une combinaison linéaire de ces fonctions propres

$$\psi(r, \theta, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_{m,n} \psi_{m,n}(r, \theta, t) \quad (2.223)$$

On trace à la figure 2.4 quelques modes propres $\psi_{m,n}(r, \theta, t = 0)$ de la membrane.

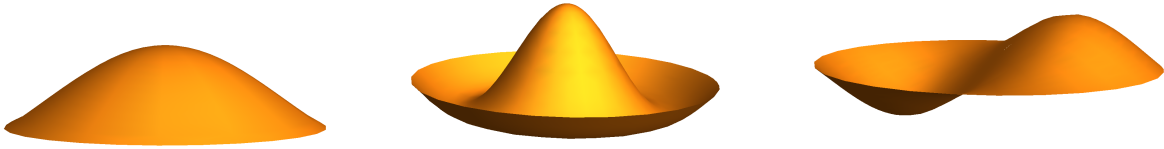


FIGURE 2.4

Tracé de $\psi_{m,n}$ pour les modes ω_{01} , ω_{02} et ω_{11} de la membrane circulaire.

Au temps $t = 0$, la configuration initiale de la membrane admettra un développement de Bessel-Fourier de la forme

$$\psi_0(r, \theta) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} J_m(\alpha_{m,n}r/a) \left[(A_{m,n} + A_{m,n}^*) \cos m\theta + (B_{m,n} + B_{m,n}^*) \sin m\theta \right], \quad (2.224)$$

alors que la vitesse initiale aura un développement

$$v_0(r, \theta) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} J_m(\alpha_{m,n}r/a) i\omega_{m,n} \left[(A_{m,n} - A_{m,n}^*) \cos m\theta + (B_{m,n} - B_{m,n}^*) \sin m\theta \right], \quad (2.225)$$

Les coefficients du développement s'obtiennent à l'aide des relations d'orthonormalisation (2.195) et (2.205) pour les fonctions de Bessel avec conditions de Dirichlet, ainsi que celles des fonctions trigonométriques sur l'intervalle $[0, 2\pi]$,

$$\int_0^{2\pi} \cos m\theta \cos m'\theta d\theta = (2)\pi \delta_{mm'}, \quad (m = 0), \quad (2.226)$$

$$\int_0^{2\pi} \sin m\theta \sin m'\theta d\theta = (0)\pi \delta_{mm'}, \quad (m = 0). \quad (2.227)$$

La projection de ψ_0 sur $J_m(\alpha_{m,n}r/a) \cos m\theta$ et $J_m(\alpha_{m,n}r/a) \sin m\theta$ permet d'obtenir respectivement les combinaisons de constantes $A_{m,n} + A_{m,n}^*$ et $B_{m,n} + B_{m,n}^*$:

$$\int_0^a \int_0^{2\pi} \psi_0(r, \theta) J_m(\alpha_{m,n}r/a) \begin{Bmatrix} \cos m\theta \\ \sin m\theta \end{Bmatrix} r dr d\theta = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\pi}{2} a^2 J_{m+1}^2(\alpha_{m,n}) \begin{Bmatrix} A_{m,n} + A_{m,n}^* \\ B_{m,n} + B_{m,n}^* \end{Bmatrix}_{m \neq 0, (m=0)}, \quad (2.228)$$

alors que la projection de v_0 sur $J_m(\alpha_{m,n}r/a) \cos m\theta$ et $J_m(\alpha_{m,n}r/a) \sin m\theta$ permet d'obtenir les combinaisons $A_{m,n} - A_{m,n}^*$ et $B_{m,n} - B_{m,n}^*$:

$$\int_0^a \int_0^{2\pi} v_0(r, \theta) J_m(\alpha_{m,n}r/a) \begin{Bmatrix} \cos m\theta \\ \sin m\theta \end{Bmatrix} r dr d\theta = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\pi}{2} i\omega_{m,n} a^2 J_{m+1}^2(\alpha_{m,n}) \begin{Bmatrix} A_{m,n} - A_{m,n}^* \\ B_{m,n} - B_{m,n}^* \end{Bmatrix}_{m \neq 0, (m=0)}. \quad (2.229)$$

Ces deux relations conduisent à l'ensemble des coefficients $A_{m,n}$ et $B_{m,n}$.

2.3.4 Équation de Laplace en coordonnées sphériques et polynômes de Legendre

Dans ce paragraphe, nous allons examiner le problème de Sturm-Liouville dans le cadre de l'équation de Laplace en électrostatique. Le problème aux conditions limites exploite la symétrie sphérique et permet d'introduire une autre famille de fonctions orthogonales que sont les polynômes de Legendre.

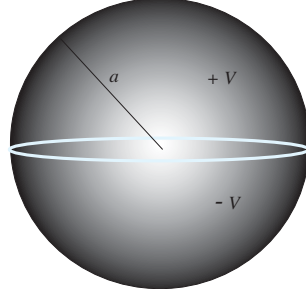


FIGURE 2.5

Deux hémisphères conductrices de rayon a , maintenues respectivement à un potentiel $+V$ et $-V$. Les hémisphères sont séparées par un anneau infinitésimal isolant dans le plan équatorial.

Considérons deux hémisphères conducteurs séparés par un anneau d'épaisseur infinitésimale. Les parties hémisphériques supérieure et inférieure sont maintenues respectivement à un potentiel $+V$ et $-V$, ce qui correspond aux conditions aux limites pour le potentiel ψ . En l'absence de charges libres, le potentiel électrostatique obéit à l'équation de Laplace

$$\nabla^2 \psi = 0, \quad (2.230)$$

dont la solution $\psi(r, \theta, \varphi) \rightarrow \psi(r, \theta)$ en coordonnées sphériques, est indépendante de l'angle azimutal φ . Cette symétrie est imposée par des conditions aux limites

$$\psi(r = a, \theta) = +V, \quad 0 \leq \theta < \frac{\pi}{2}, \quad (2.231)$$

$$\psi(r = a, \theta) = -V, \quad \frac{\pi}{2} < \theta \leq \pi, \quad (2.232)$$

indépendantes de φ . Ainsi en utilisant la forme du laplacien en coordonnées sphériques, l'équation de Laplace se réduit à la forme

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) = 0. \quad (2.233)$$

La substitution par l'expression produit $\psi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$ permet d'écrire

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = - \frac{1}{\Theta(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \quad (2.234)$$

pour laquelle la partie radiale de gauche est séparée de la partie angulaire de droite. On introduit la constante de séparation $-\lambda$ et on obtient alors les deux équations

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \lambda R(r) = 0, \quad (2.235)$$

$$\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \lambda \Theta \sin \theta = 0. \quad (2.236)$$

Équation angulaire et polynômes de Legendre Considérons dans un premier temps la partie angulaire. Par le changement de variable $x = \cos \theta$ pour lequel $\sin \theta = \sqrt{1-x^2}$ et $dx/d\theta = -\sqrt{1-x^2}$ sur tout l'intervalle

Chapitre 2. Équations différentielles

$\pi \leq \theta \leq 0$, l'équation pour Θ devient donc

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} - \lambda\Theta = 0, \quad (2.237)$$

qui est l'équation de Legendre (cf. éq. (2.86)). Par inspection, cette équation a des points réguliers singuliers en $x = \pm 1$. Le point $x = 0$ est cependant régulier et admet donc une solution en série de puissances de la forme

$$\Theta(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n. \quad (2.238)$$

Sa substitution dans (2.237) conduit par la méthode de la section 2.2.1 à la relation de récurrence pour les coefficients c_n ,

$$c_{n+2} = \frac{n(n+1) + \lambda}{(n+1)(n+2)} c_n, \quad (2.239)$$

ce qui donne explicitement

$$c_2 = \frac{\lambda}{2} c_0, \quad (2.240)$$

$$c_3 = \frac{\lambda+2}{6} c_1, \quad (2.241)$$

$$c_4 = \frac{\lambda+6}{12} c_2, \quad (2.242)$$

$$c_5 = \frac{\lambda+12}{20} c_3, \quad (2.243)$$

⋮

On constate que les coefficients des puissances paires sont séparés de ceux des puissances impaires. En fait, l'équation de Legendre étant invariante sous transformation de parité $x \rightarrow -x$, les solutions seront donc de parité définie et on peut écrire la solution générale sous la forme d'une somme de solutions paire et impaire

$$\Theta(x) = a_1 \sum_{n=0,2,\dots}^{\infty} c_n x^n + a_2 \sum_{n=1,3,\dots}^{\infty} c_n x^n, \quad (2.244)$$

Bien que convergentes pour $|x| < 1$, ces séries divergent en $x = \pm 1$ qui sont des points réguliers singuliers appartenant à l'intervalle de variation de θ , soit en $\theta = 0, \pi$. Afin d'éviter la singularité en ces points qui ne serait pas physique, on peut fixer la constante de séparation de manière à tronquer les séries. Si $-\lambda$ est un entier positif, il est clair selon (2.239), qu'il existe un n à partir duquel les coefficients s'annuleront. Il est commode de remplacer $-\lambda$ par l'expression

$$-\lambda = \ell(\ell+1), \quad \ell = 0, 1, \dots, \quad (2.245)$$

où à chaque valeur de ℓ positive correspond une seule valeur de $-\lambda$. Pour chaque entier ℓ , il y aura une solution particulière sous forme de polynômes, appelés *polynômes de Legendre*.

Pour $\ell = 0, 2, 4, \dots$, on pose $c_1 = 0$ et $c_0 \neq 0$, et on obtient facilement à l'aide de la relation de récurrence les quelques polynômes suivants $\Theta_\ell(x)$:

$$\Theta_0(x) = c_0, \quad (2.246)$$

$$\Theta_2(x) = -2c_0 \left[\frac{1}{2}(3x^2 - 1) \right], \quad (2.247)$$

$$\Theta_4(x) = \frac{8}{3}c_0 \left[\frac{1}{8}(3 - 30x^2 + 35x^4) \right], \quad (2.248)$$

⋮

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

De même pour $\ell = 1, 3, \dots$, on pose $c_1 \neq 0$ et $c_0 = 0$ pour obtenir selon (2.239)

$$\Theta_1(x) = c_1 x, \quad (2.249)$$

$$\Theta_3(x) = -c_1 \frac{2}{3} \left[\frac{1}{2} (5x^3 - 3x) \right], \quad (2.250)$$

\vdots

Par convention, les polynômes de Legendre sont définis en fixant c_0 et c_1 par les expressions

$$c_0 = (-1)^{\ell/2} \frac{\ell!}{2^\ell \left[\frac{\ell}{2}! \right]^2}, \quad (2.251)$$

$$c_1 = (-1)^{(\ell-1)/2} \frac{\ell!}{2^{\ell-1} \left[\left(\frac{\ell-1}{2} \right)! \right]^2}, \quad (2.252)$$

qui sont fonction de ℓ , ce qui fixe chaque constante devant les expressions entre crochets à un. Ces dernières sont appelées *polynômes de Legendre*, et sont notés $P_\ell(x)$:

$$P_0(x) = 1, \quad (2.253)$$

$$P_1(x) = x, \quad (2.254)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad (2.255)$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \quad (2.256)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \quad (2.257)$$

\vdots

Le tracé de quelques polynômes est donné à la figure 2.6. On remarque que le nombre de noeuds (zéros) du polynôme P_ℓ sur l'intervalle $[-1, 1]$ correspond à la valeur de ℓ .

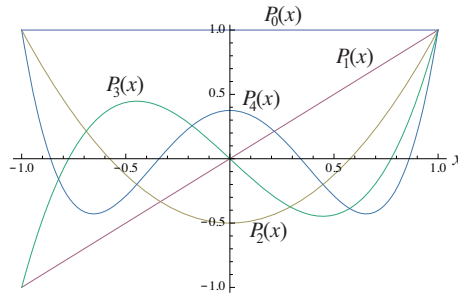


FIGURE 2.6

Tracé des cinq premiers polynômes de Legendre.

Les polynômes de Legendre obéissent à l'équation (2.236) qui a la forme Sturm-Liouville (2.163),

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} P_\ell(x) \right] = -\lambda_\ell P_\ell(x), \quad (2.258)$$

avec, par identification, $p(x) = 1 - x^2$, $q(x) = 0$ et finalement, $w(x) = 1$ pour la fonction poids. Selon (2.181), l'ensemble des P_ℓ obéiront à la relation d'orthonormalisation

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx = N_\ell \delta_{\ell\ell'}, \quad (2.259)$$

Chapitre 2. Équations différentielles

où N_ℓ est la constante de normalisation.

Pour déterminer N_ℓ , il est commode d'utiliser la fonction génératrice des polynômes de Legendre :

$$G(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}}. \quad (2.260)$$

Pour $|x| < 1$ et $t < 1$, cette fonction admet en effet le développement

$$\begin{aligned} G(x, t) &= 1 + \frac{1}{2}t(2x - t) + \frac{3}{2^2 2!}t^2(2x - t)^2 + \dots + \frac{1 \cdot 3 \cdots (2n - 1)}{2^n n!}t^n(2x - t)^n + \dots, \\ &= 1 + xt + \frac{1}{2}(3x^2 - 1)t^2 + \dots, \\ &= 1 + P_1(x)t + P_2(x)t^2 + \dots \equiv \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(x)t^\ell. \end{aligned} \quad (2.261)$$

Si on intègre de part et d'autre le carré de cette équation sur l'intervalle $[-1, 1]$, on obtient

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} G^2(x, t) dx &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\ell'=0}^{\infty} t^{\ell+\ell'} \int_{-1}^{+1} P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx, \\ \int_{-1}^{+1} \frac{1}{1 + t^2 - 2xt} dx &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\ell'=0}^{\infty} t^{\ell+\ell'} \delta_{\ell\ell'} \int_{-1}^{+1} P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx, \\ \frac{1}{t} \ln \frac{1+t}{1-t} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} t^{2\ell} \int_{-1}^{+1} P_\ell^2(x) dx, \\ 2 \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{t^{2\ell}}{2\ell + 1} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} t^{2\ell} \int_{-1}^{+1} P_\ell^2(x) dx, \end{aligned} \quad (2.262)$$

ce qui par égalité des puissances de part d'autre conduit à la normalisation

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell^2(x) dx = \frac{2}{2\ell + 1} \quad (2.263)$$

$$\equiv N_\ell. \quad (2.264)$$

Lorsqu'elle est exprimée à l'aide de la coordonnée originale θ , la relation d'orthonormalisation est donnée par

$$\int_0^\pi P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'}. \quad (2.265)$$

Équation radiale Il nous reste maintenant à solutionner l'équation radiale (2.235). En utilisant (2.245), celle-ci prend la forme

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} R = 0, \quad (2.266)$$

laquelle coïncide avec l'équation d'Euler (2.88). L'équation auxiliaire ou indicelle donnera les deux racines $s_1 = \ell$ et $s_2 = -(\ell + 1)$. Les deux solutions seront donc de la forme

$$R(r) \sim \begin{cases} r^\ell, & s_1 = \ell \\ r^{-(\ell+1)}, & s_2 = -(\ell + 1). \end{cases}$$

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

Comme on s'intéresse à la valeur du potentiel à l'intérieur de la sphère, la deuxième solution est singulière à l'origine et n'est pas acceptable physiquement. Seulement la première solution, régulière sur tout l'intervalle $[0, a]$, doit être retenue⁹.

Les fonctions propres solutions de l'équation de Laplace à $r \leq a$ seront alors données par

$$\psi_\ell(r, \theta) = r^\ell P_\ell(\cos \theta). \quad (2.267)$$

La solution générale s'écrira sous forme d'un développement de Legendre-Fourier

$$\psi(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_\ell r^\ell P_\ell(\cos \theta). \quad (2.268)$$

Les coefficients A_ℓ de la série sont déterminés par la condition aux limites $\psi(a, \theta)$ spécifiées au début. En projetant $P_\ell(\cos \theta)$ sur cette dernière, on trouve

$$A_\ell = \frac{2\ell + 1}{2a^\ell} \int_0^\pi \psi(a, \theta) P_\ell(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (2.269)$$

Comme $\psi(a, \theta)$ est impaire par rapport à l'équateur en $\theta = \pi/2$ et que les P_ℓ ont une parité bien définie, seules les valeurs de ℓ impaires sont admissibles. On trouve en définitive

$$A_\ell = V \frac{2\ell + 1}{a^\ell} \int_0^{\pi/2} P_\ell(\cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad \ell = 1, 3, \dots \quad (2.270)$$

2.3.5 Équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène : fonctions de Legendre et Laguerre associées

On considère dans ce qui suit le problème d'un électron de charge e – que l'on supposera sans spin – sous l'action d'un potentiel central de Coulomb,

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}, \quad (2.271)$$

produit par un proton de charge positive, où r est la distance radiale relative entre le proton et l'électron. C'est le problème de l'atome d'hydrogène en mécanique quantique non relativiste. L'équation de Schrödinger (2.32) dans le système du centre de masse au repos prend la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(r) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.272)$$

où m ($\approx m_e$) est la masse réduite. Comme $V(r)$ est indépendant du temps, on peut chercher des états stationnaires de la forme $\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) \chi(t)$, ce qui conduit à la séparation des variables d'espace et de temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + V(r) \varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) \underbrace{i \frac{\hbar}{\chi} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t}}_E \quad (2.273)$$

où E est la constante de séparation ayant les unités d'énergie, soit celles des états stationnaires. L'équation pour $\chi(t)$ admet une solution immédiate sous forme d'exponentielle oscillante :

$$\chi(t) \sim e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.274)$$

9. Dans le cas où le potentiel recherché est à l'extérieur de la sphère, seule la deuxième solution en $R \sim r^{-(\ell+1)}$ serait retenue.

Chapitre 2. Équations différentielles

L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut s'écrire sous la forme d'une équation homogène :

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + \frac{2m e^2}{\hbar^2 r} \varphi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.275)$$

où pour notre problème de potentiel central, on exprime le laplacien en coordonnées sphériques :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}, \quad (2.276)$$

ce qui par inspection suggère une séparation des variables r et θ, ϕ pour la fonction d'onde :

$$\varphi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \phi), \quad (2.277)$$

pour laquelle, nous avons rassemblé toute la dépendance angulaire au sein de la fonction Y . En substituant (2.277) dans (2.275), on trouve :

$$\underbrace{\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + r \frac{2me^2}{\hbar^2} R + r^2 \frac{2m}{\hbar^2} ER}_{\equiv -\lambda_1} = R \left[-\frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right], \quad (2.278)$$

où l'égalité est satisfaite en introduisant une deuxième constante de séparation λ_1 entre les variables radiale (r) et angulaires (θ, ϕ). Il en découle deux équations : l'une radiale,

$$\boxed{\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + r \frac{2me^2}{\hbar^2} R + r^2 \frac{2m}{\hbar^2} ER + \lambda_1 R = 0} \quad (2.279)$$

et l'autre angulaire :

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} - \lambda_1 Y(\theta, \phi) = 0. \quad (2.280)$$

Par l'absence de dérivées croisant θ et ϕ , cette dernière équation est également séparable. Ainsi, en posant

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi), \quad (2.281)$$

nous obtenons

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) - \lambda_1 \Theta(\theta) = \underbrace{\frac{\Theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \left(-\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} \right)}_{\equiv -\lambda_2}, \quad (2.282)$$

qui est ici aussi vérifiée avec l'introduction d'une autre constante de séparation λ_2 . On est donc amené à considérer les deux équations de la partie angulaire :

$$\boxed{\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) - \lambda_1 \sin \theta \Theta(\theta) + \lambda_2 \frac{\Theta(\theta)}{\sin \theta} = 0} \quad (2.283)$$

$$\boxed{\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = \lambda_2 \Phi(\phi)} \quad (2.284)$$

Nous procédons maintenant à la solution (2.284), (2.283) et (2.279).

Considérons en premier lieu l'équation de la variable azimutale ϕ . Celle-ci doit obligatoirement admettre une solution périodique par rotation de 2π autour de l'axe z , soit

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi), \quad (2.285)$$

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

à savoir que Φ est uniévaluée. On peut voir cette condition, comme une *condition aux limites périodique* d'un problème Sturm-Liouville. On choisira alors comme solutions les formes exponentielles :

$$\Phi_{\pm m}(\phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{\pm im\phi}, \quad (2.286)$$

avec $\lambda_2 = -m^2$ où selon (2.285), $m = 0, 1, 2, \dots$ est *quantifié* par un entier positif. Ici la constante $1/\sqrt{2\pi}$ assure la normalisation des Φ_m sur l'intervalle $[0, 2\pi]$:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi) \Phi_{m'}(\phi) d\phi = \delta_{m,m'}. \quad (2.287)$$

On considère maintenant l'équation (2.283). Pour la fonction Θ , il est préférable de procéder au changement de variable déjà introduit dans le cadre de l'équation de Laplace en coordonnées sphériques (c.f. § 2.3.4), soit $x = \cos \theta$, ce qui permet d'écrire

$$(1-x^2) \frac{d^2\Theta(x)}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta(x)}{dx} - \left(\lambda_1 + \frac{m^2}{1-x^2} \right) \Theta(x) = 0. \quad (2.288)$$

qui est l'équation de *Legendre associée*. Elle diffère de l'équation de Legendre (2.237) par le terme supplémentaire en ' m^2 '. À l'instar de cette dernière, elle possède des points réguliers singuliers en $x = \pm 1$. Ainsi, en posant dans un premier temps, $z = 1 - x$, l'équation (2.288) devient

$$z(2-z)\Theta''(z) + 2(1-z)\Theta'(z) + \left(-\lambda_1 - \frac{m^2}{z(2-z)} \right) \Theta = 0 \quad (2.289)$$

où $z = 0$ est un point régulier singulier. En substituant une solution de type Fröbenius $\Theta = z^s \sum_k a_k z^k$ autour de ce point, on obtient sans difficulté l'équation indicelle :

$$s^2 = \frac{m^2}{4} \rightarrow s_{1,2} = \pm \frac{m}{2}. \quad (2.290)$$

Ainsi les deux racines diffèrent d'un entier et une seule solution série de Fröbenius pour s_1 existe autour de $z = 0$ (ou $x = 1$), l'autre solution pour s_2 possède un point de branchement à $z = 0$ [c.f. Eq. 2.108], ce qui n'est donc pas acceptable physiquement. Elle ne pourra donc pas être retenue. On procède de manière analogue autour de $x = -1$ en posant $z = 1 + x$. On obtient alors,

$$z(2-z)\Theta''(z) + 2(1-z)\Theta'(z) + \left(-\lambda_1 - \frac{m^2}{z(2-z)} \right) \Theta = 0 \quad (2.291)$$

qui coïncide avec celle obtenue précédemment. Il en résulte qu'une seule série de Fröbenius existe autour de $z = 0$ ($x = -1$) avec la même racine $s_1 = +m/2$. De ce constat, il est commode pour l'équation de Legendre associée (2.288) de poser une solution de la forme :

$$\Theta(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} u(x), \quad (2.292)$$

qui après substitution et quelques lignes d'algèbre conduit à une équation pour $u(x)$:

$$(1-x^2)u''(x) - 2(m+1)xu'(x) - (\lambda_1 + m^2 + m)u(x) = 0. \quad (2.293)$$

Il s'agit maintenant de regarder la solution pour $u(x)$ autour cette fois-ci du point régulier $x = 0$, avec la série de Taylor :

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n. \quad (2.294)$$

Sa substitution dans (2.293) conduit sans difficulté à la relation de récurrence pour les a_n :

$$a_{n+2} = \frac{(n+m)(n+m+1) + \lambda_1}{(n+1)(n+2)} a_n. \quad (2.295)$$

D'emblée, les coefficients avec n pair sont découplés de ceux avec n impair, signifiant que nous avons affaire à des solutions de parité déterminée. Cependant, la série de Taylor a un rayon de convergence limitée. En effet, $x = \pm 1$ étant réguliers singuliers, la série divergera en ces points, ce qui n'est pas acceptable physiquement – la fonction d'onde étant évidemment régulière aux pôles $\theta = 0(x = 1)$ ou $\theta = \pi(x = -1)$. Pour remédier à ce problème, on peut tronquer la série à un polynôme de puissance finie en fixant la constante de séparation λ_1 à une valeur entière annulant a_{n+2} pour un certain n et pour un m donné. Cette valeur de λ_1 est nécessairement négative et satisfait la relation

$$\lambda_1 = -\underbrace{(n+m)}_{\equiv \ell} \underbrace{(n+m+1)}_{\ell+1}, \quad (2.296)$$

ce qui définit le nombre ℓ entier. On voit immédiatement que pour $n = 0$, $\ell = m$, alors que pour $n > 0$, $\ell > m$. On conclut que ℓ , en tant qu'entier positif, est contraint par l'inégalité

$$\ell \geq m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.297)$$

Nous verrons plus loin la signification physique très importante de cette contrainte pour le moment cinétique de l'électron.

On peut maintenant expliciter à partir de la formule récurrence (2.295) et de (2.296) les polynômes solutions de la fonction u , lesquels conduiront via (2.292) aux *polynômes de Legendre associés de première espèce*. On vérifie également que dans le cas particulier $m = 0$, la relation de récurrence (2.295) se réduit à celle de (2.239) pour les polynômes de Legendre,

$$\Theta_\ell^{m=0}(x) = P_\ell(x). \quad (2.298)$$

Dans le cas $m \neq 0$, on peut expliciter à l'aide de (2.295) quelques polynômes. Pour $\ell = 1$, nous aurons $m = 1$ comme seule valeur de m admissible en conformité avec la contrainte (2.297). Dans ce cas, nous avons qu'une solution paire avec $a_0 \neq 0$ et $a_{2,4,\dots} = 0$, ce qui conduit à

$$\Theta_1^1(x) = a_0 \underbrace{(1-x^2)^{\frac{1}{2}}}_{P_1^1(x)}. \quad (2.299)$$

Pour $\ell = 2$, nous aurons selon (2.297), les valeurs $m = 1$ et $m = 2$. Dans le premier cas, seule une solution impaire pour $u(x)$ est possible selon (2.295), avec $a_1 \neq 0$ et $a_{3,5,\dots} = 0$. Nous aurons dans ce cas précis :

$$\Theta_2^1(x) = \frac{1}{3} a_1 \underbrace{3x(1-x^2)^{\frac{1}{2}}}_{\equiv P_2^1(x)} \quad (2.300)$$

De même pour $m = 2$, nous aurons une solution paire avec $a_0 \neq 0$, et $a_{2,4,\dots} = 0$, ce qui donne

$$\Theta_2^2(x) = \frac{1}{3} a_0 \underbrace{3(1-x^2)}_{\equiv P_2^2(x)} \quad (2.301)$$

et ainsi de suite pour les autres valeurs de ℓ et m . Dans les expressions précédentes, le choix de la constante multiplicative dans la définition des $P_\ell^m(x)$ est fixé en fonction de la normalisation que nous précisons sans démonstration en (2.303). En procédant de la même manière pour d'autres valeurs de ℓ et $m \neq 0$, on arrive à l'ensemble des polynômes de Legendre associés. En voici quelques uns :

$$\begin{aligned} P_1^1(x) &= (1-x^2)^{\frac{1}{2}}, & P_3^1(x) &= \frac{3}{2}(1-x^2)^{\frac{3}{2}}(5x^2-1), \\ P_1^2(x) &= (1-x^2)^{\frac{1}{2}}3x, & P_3^2(x) &= 15x(1-x^2), \\ P_2^2(x) &= 3(1-x^2), & P_3^3(x) &= 15(1-x^2)^{\frac{3}{2}} \\ & \dots & & \end{aligned} \quad (2.302)$$

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

Comme l'équation de Legendre associée (2.288) peut être mise sous la forme d'un problème Sturm-Liouville sur l'intervalle $x \in [-1, 1]$, avec conditions aux limites en $x = \pm 1$, les $P_\ell^m(x)$ sont des polynômes orthogonaux pour différentes valeurs de ℓ . La relation d'orthonormalisation sera de la forme

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m(x) dx = \frac{2}{2\ell + 1} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!} \delta_{\ell\ell'}. \quad (2.303)$$

Afin d'avoir des fonctions orthogonales $\Theta_\ell^m(x)$ normées à 1, on peut ajuster chaque constante comme une fonction de ℓ et m et définir

$$\Theta_\ell^m(x) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{2}} \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_\ell^m(x), \quad (2.304)$$

comme fonctions satisfaisant à la relation

$$\int_{-1}^{+1} \Theta_\ell^m(x) \Theta_{\ell'}^m(x) dx = \delta_{\ell\ell'}, \quad (2.305)$$

ou encore de retour avec l'angle θ :

$$\int_0^\pi \Theta_\ell^m(\theta) \Theta_{\ell'}^m(\theta) \sin \theta d\theta = \delta_{\ell\ell'}. \quad (2.306)$$

Harmoniques sphériques Nous sommes maintenant en mesure de construire les fonctions normalisées $Y(\theta, \phi)$ de l'angle solide $\Omega = (\theta, \phi)$ et connues sous le nom d'*harmoniques sphériques*. Selon la définition (2.281), et les expressions (2.304) et (2.286), on peut écrire

$$Y(\theta, \phi) \rightarrow Y_\ell^m(\theta, \phi) = \Theta_\ell^m(\theta) \Phi_m(\phi), \quad (2.307)$$

ce qui devient explicitement

$$Y_\ell^{\pm m}(\theta, \phi) = \alpha_{\ell, \pm m} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{\pm im\phi} \quad (2.308)$$

où $\alpha_{\ell, m}$ est une convention de phase : $\alpha_{\ell, \pm m} = (-1)^{\ell \pm m}$. Les harmoniques sphériques obéissent à la relation

$$Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_\ell^{-m}(\theta, \phi). \quad (2.309)$$

Leur relation d'orthonormalisation prend la forme

$$\underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta}_{\int d\Omega} Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) Y_{\ell'}^m(\theta, \phi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (2.310)$$

Les Y_ℓ^m sont donc des fonctions propres de l'angle solide Ω . Ainsi toute fonction $f(\theta, \phi)$, continue en (θ, ϕ) , peut être décomposée sur les harmoniques sphériques,

$$f(\theta, \phi) = \sum_{\ell, m} A_{\ell, m} Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (2.311)$$

où les composantes du développement sont données par

$$A_{\ell, m} = \int f(\theta, \phi) Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) d\Omega. \quad (2.312)$$

Voici quelques harmoniques sphériques :

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (2.313)$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (2.314)$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (2.315)$$

Si nous revenons à la partie restante radiale (2.279) de l'équation de Schrödinger, celle-ci prend maintenant la forme

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + r \frac{2me^2}{\hbar^2} R + r^2 \frac{2m}{\hbar^2} ER - \ell(\ell + 1)R = 0. \quad (2.316)$$

On pose $R(r) = \frac{1}{r}u(r)$, ce qui conduit après quelques manipulations algébriques à l'expression :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} \right)}_{V_{\text{eff}}} u = Eu \quad (2.317)$$

et transforme la partie radiale en une équation de Schrödinger effective 'unidimensionnelle' pour u sur l'intervalle $r \in [0, \infty]$ avec comme potentiel effectif

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} - \frac{e^2}{r}, \quad (2.318)$$

lequel comprend outre la partie coulombienne attractive provenant du noyau, une contribution répulsive de la 'barrière centrifuge' $\sim \ell(\ell + 1)/r^2$ éloignant la particule de ce dernier.

Afin de parvenir à une solution pour $u(r)$ et finalement $R(r)$, il est instructif de travailler en variables réduites sans dimension. On introduit les grandeurs caractéristiques de la vieille théorie des quanta, soit le rayon de Bohr

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad (2.319)$$

et l'énergie d'ionisation

$$E_I = \frac{me^4}{2\hbar^2}, \quad (2.320)$$

pour ainsi introduire la variable réduite

$$\rho \equiv \frac{r}{a_0} \quad (2.321)$$

et l'énergie réduite

$$\frac{E}{E_I} \equiv -\lambda^2, \quad (2.322)$$

que l'on posera négative dans la recherche d'états liés. L'équation radiale devient alors

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}u - \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2}u - \lambda^2u = 0, \quad (2.323)$$

laquelle présente un point régulier singulier à l'origine. À l'instar de la situation pour l'oscillateur harmonique linéaire (§ 2.2.1), il est utile de dégager le comportement de l'équation à $\rho \rightarrow \infty$, soit là où l'action de V_{eff} devient négligeable. Dans cette limite, l'équation prend la forme simple :

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow \lambda^2u, \quad (2.324)$$

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

laquelle admet une seule solution acceptable physiquement, soit

$$u \sim e^{-\lambda\rho}, \quad (2.325)$$

qui est compatible avec un comportement de carré sommable pour la fonction d'onde d'un état lié.

Pour la partie radiale, on posera donc, $u = e^{-\lambda\rho} y(\rho)$, qui par substitution dans (2.323) donne l'équation pour y :

$$\frac{d^2 y}{d\rho^2} - 2\lambda \frac{dy}{d\rho} + \frac{2}{\rho} y - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} y = 0 \quad (2.326)$$

Le point $\rho = 0$ est toujours de type régulier singulier. On peut chercher une solution de type Fröbenius,

$$y(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k, \quad (2.327)$$

ce qui par substitution conduit à l'équation indicielle

$$s^2 - s - \ell(\ell+1) = 0, \quad (2.328)$$

et aux exposants $s_1 = \ell + 1$ et $s_2 = -\ell$. D'emblée, la solution donnée par s_2 présente une singularité non physique à l'origine et ne peut donc être retenue. On pose alors pour la première solution,

$$y = \rho^{\ell+1} L(\rho), \quad (2.329)$$

où $L(\rho)$ est une nouvelle fonction d'interpolation entre les grandes et les faibles distances. La fonction radiale u devient

$$u \sim \rho^{\ell+1} L(\rho) e^{-\rho\lambda}. \quad (2.330)$$

Afin d'obtenir une équation pour L , on procède dans un premier temps à la réécriture de (2.323) :

$$\frac{1}{\lambda^2} \frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{2}{\lambda^2 \rho} u - \frac{\ell(\ell+1)}{\lambda^2 \rho^2} u - u \rightarrow \frac{d^2 u}{d\bar{\rho}^2} + \frac{\bar{\lambda}}{\bar{\rho}} u - \frac{\ell(\ell+1)}{\bar{\rho}^2} u - u = 0, \quad (2.331)$$

avec la redéfinition $\bar{\rho} = \lambda\rho$, suivie de $\bar{\lambda} = 2/\lambda$. On substitue alors l'expression

$$u \sim \bar{\rho}^{\ell+1} L(\bar{\rho}) e^{-\bar{\rho}} \quad (2.332)$$

dans (2.331) et on obtient l'équation pour L :

$$\bar{\rho} \frac{d^2 L}{d\bar{\rho}^2} + [2(\ell+1) - 2\bar{\rho}] \frac{dL}{d\bar{\rho}} + 2[n - (\ell+1)]L = 0, \quad (2.333)$$

où nous avons introduit $\bar{\lambda} = 2n$. Un changement d'échelle de distance $\tilde{\rho} = 2\bar{\rho}$ conduit finalement à l'équation

$$\tilde{\rho} \frac{d^2 L}{d\tilde{\rho}^2} + [2(\ell+1) - \tilde{\rho}] \frac{dL}{d\tilde{\rho}} + [n - (\ell+1)]L = 0. \quad (2.334)$$

On reconnaît la forme de l'équation hypergéométrique confluyente (2.144) avec le dictionnaire de correspondances $a \leftrightarrow (\ell+1) - n$ et $c \leftrightarrow 2(\ell+1)$. Ainsi,

$$L(\tilde{\rho}) \rightarrow \Phi((\ell+1) - n, 2(\ell+1), \tilde{\rho}), \quad (2.335)$$

où Φ est la fonction hypergéométrique confluyente avec le développement en série (2.145).

La solution radiale $R(\rho)$ est donc de la forme

$$R(\rho) \sim \rho^\ell \Phi(\ell+1 - n, 2(\ell+1), 2\rho/n) e^{-\rho/n}. \quad (2.336)$$

Il suffit maintenant d'établir les conditions pour qu'une telle fonction puisse être de carré sommable. En fait, dans la limite des grandes distances, la fonction hypergéométrique confluyente (2.145) possède le comportement asymptotique suivant :

$$\Phi(a, c, x \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} x^{a-c} e^x. \quad (2.337)$$

Il s'ensuit alors

$$R(\rho \rightarrow \infty) \rightarrow \rho^{-n} \frac{\Gamma[2(\ell + 1)]}{\Gamma(\ell + 1 - n)} e^{+\rho/2n}, \quad (2.338)$$

qui présente une croissance exponentielle non physique, *sauf* si

$$\begin{aligned} \ell + 1 - n &= 0 - 1, -2, \dots \\ &\equiv -k + 1, \quad k = 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \quad (2.339)$$

est un entier négatif ou nul. Dans ces conditions, $\Gamma(1 - k) = \pm\infty$ ¹⁰, impliquant à son tour, $R(\rho \rightarrow \infty) = 0$, et qui est acceptable physiquement.

L'impact de cette condition est considérable. D'une part, selon l'expression de la fonction hypergéométrique confluyente (2.145), lorsque $a = 1 - k$ est un entier négatif ou nul, la fonction $\Phi(1 - k, 2(\ell + 1), 2\rho/n)$ devient un polynôme de degré fini dont les caractéristiques seront précisées ci-dessous. De plus, la condition (2.339) mène directement à la quantification de l'énergie. En effet, selon (2.339), $n = k + \ell = 1, 2, \dots$ est un entier positif non nul et si on revient à l'expression (2.322) pour l'énergie, on aura

$$E \rightarrow E_n = -\frac{E_I}{n^2}, \quad n = \ell + k = \ell + 1, \ell + 2, \dots \quad (2.340)$$

qui correspond à l'énergie des états liés de l'atome d'hydrogène.

Selon (2.277) et (2.336), les fonctions propres (états stationnaires) d'énergie E_n sont données par

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) \rightarrow \varphi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) &\sim R_{n,\ell}(\rho) Y_\ell^m(\theta, \phi) \\ &\sim \rho^\ell \Phi(1 - k, 2(\ell + 1), \rho/n) e^{-\rho/n} Y_\ell^m(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (2.341)$$

où les n, ℓ, m constituent les *nombre quantiques* des états stationnaires de l'atome d'hydrogène.

Afin de normaliser (2.349), il nous faut spécifier la nature polynomiale de $\Phi(1 - k, 2(\ell + 1), 2\rho/n)$ en fonction des nombres quantiques k (ou n) et ℓ . Pour y parvenir, il est instructif de revenir à l'équation (2.334), laquelle peut aussi s'écrire,

$$\tilde{\rho} \frac{d^2 L}{d\tilde{\rho}^2} + \underbrace{[(2\ell + 1) + 1 - \tilde{\rho}]}_\mu \frac{dL}{d\tilde{\rho}} + \underbrace{[(n + \ell) - (2\ell + 1)]}_s \underbrace{L}_\mu = 0. \quad (2.342)$$

Cette équation est connue sous le nom de *d'équation de Laguerre associée*. Elle se distingue de l'équation de Laguerre par la présence des termes en μ . Comme nous venons de le voir les solutions pour μ et s entiers sont des polynômes, les *polynômes de Laguerre associés*, que nous noterons $L_s^\mu(\tilde{\rho})$. Ils sont liés à la fonction hypergéométrique confluyente par la relation :

$$L_s^\mu(\tilde{\rho}) = \Phi(\mu - s, \mu + 1, \tilde{\rho}) \quad (2.343)$$

10. On peut étendre la définition de la fonction Gamma $\Gamma(m)$ en (1.233) vers des valeurs m négatives en utilisant la relation de récurrence

$$m\Gamma(m) = \Gamma(m + 1).$$

Ainsi, si $m = j + l$ où j est un entier négatif ou nul et l est un entier positif ou nul tel que $m + 1 > 0$, nous pouvons écrire

$$\Gamma(j) = \frac{\Gamma(j + l + 1)}{(j + l)(j + l - 1) \cdots j}$$

qui définit $\Gamma(j \leq 0)$ à l'aide de $\Gamma(j + l + 1) = (j + l)!$ [$\Gamma(1) = 0! = 1$] et d'un pôle simple suite à une des parenthèses au dénominateur qui passe par zéro. Ainsi $\Gamma(j) = (-1)^j \infty$, pour $j \leq 0$.

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

Les polynômes de Laguerre associés sont quant à eux reliés aux polynômes de Laguerre $L_s(\tilde{\rho})$:

$$L_s^\mu(\tilde{\rho}) = \frac{d^\mu L_s}{d\tilde{\rho}^\mu} \quad (2.344)$$

où les $L_s(\tilde{\rho})$ peuvent être obtenus par la formule de Rodrigues ¹¹ :

$$L_s(\tilde{\rho}) = e^{\tilde{\rho}} \frac{d^s}{d\tilde{\rho}^s} (\tilde{\rho}^s e^{-\tilde{\rho}}) \quad (2.345)$$

On note que $L_s^0(\tilde{\rho}) = L_s(\tilde{\rho})$. Voici quelques polynômes de Laguerre associés :

$$\begin{aligned} L_1^1(\tilde{\rho}) &= -1; & L_2^1(\tilde{\rho}) &= 2\tilde{\rho} - 4; & L_2^2(\tilde{\rho}) &= 2; & L_3^1(\tilde{\rho}) &= -3\tilde{\rho}^2 + 18\tilde{\rho} - 18 \\ L_3^2(\tilde{\rho}) &= -6\tilde{\rho} + 18; & L_3^3(\tilde{\rho}) &= -6; & L_4^1(\tilde{\rho}) &= 4\tilde{\rho}^3 - 48\tilde{\rho}^2 + 144\tilde{\rho} - 96; & \dots \end{aligned} \quad (2.346)$$

Les polynômes obéissent à la relation d'orthonormalisation sur l'intervalle $[0, \infty]$:

$$\int_0^\infty \tilde{\rho}^\mu e^{-\tilde{\rho}} L_s^\mu(\tilde{\rho}) L_{s'}^\mu(\tilde{\rho}) d\tilde{\rho} = \frac{(s!)^3}{(s-\mu)!} \delta_{ss'} \quad (2.347)$$

Si on revient aux états stationnaires, ils peuvent être dès lors être mis sous la forme :

$$\varphi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) = C_{n,\ell} \tilde{\rho}^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\tilde{\rho}) e^{-\tilde{\rho}/2} Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (2.348)$$

La constante de normalisation $C_{n,\ell}$ s'obtient par la condition

$$\int_0^\infty \int |\varphi_{n,\ell,m}|^2 r^2 dr d\Omega = 1,$$

ce qui à l'aide de (2.310) et (2.347) permet d'écrire à un facteur de phase près ¹²

$$\varphi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) = \left[\frac{4(n-\ell-1)!}{(na_0)^3 n[(n+\ell)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2r/(na_0)) e^{-\frac{r}{na_0}} Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (2.349)$$

en tant qu'états stationnaires normalisés pour l'atome d'hydrogène.

Harmoniques sphériques et moment cinétique orbital

Lors de l'établissement de la solution de la partie angulaire de l'équation de Schrödinger, nous avons fait apparaître le nombre quantique ℓ lié à la constante de séparation λ_1 en (2.296), permettant de rendre la fonction $\Theta_\ell^m(\theta)$ analytique sur tout l'intervalle $[0, \pi]$ pour l'angle θ . La signification physique de ℓ n'est cependant pas transparente. Comme ℓ est lié à la variable angulaire θ , on peut s'attendre à ce que le moment cinétique orbital soit en fait relié à ce nombre quantique. Ce qu'on se propose de faire dans ce paragraphe, c'est de montrer que les harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ sont en fait des fonctions propres simultanées du carré du moment cinétique L^2 et de sa composante L_z .

11. On notera ici que le choix de la constante multiplicative dans l'expression des L_s^μ diffère d'un texte à l'autre. Ici, nous avons pris la convention d'exclure le facteur $1/s!$ dans le membre de droite de la relation de Rodrigues. Évidemment, la relation d'orthonormalisation (2.347) reflètera cette convention.

12. Dans l'obtention de la constante de normalisation, il est utile de faire appel à la relation de récurrence suivante :

$$\left(\frac{s-\mu+1}{s+1} \right) L_{s+1}^\mu + (\tilde{\rho} + \mu - 2s - 1) L_s^\mu + \mu^2 L_{s-1}^\mu = 0,$$

qui, à l'aide de la relation d'orthonormalisation (2.347), conduit au résultat particulier :

$$\int_0^\infty \tilde{\rho}^{\mu+1} e^{-\tilde{\rho}} [L_s^\mu(\tilde{\rho})]^2 d\tilde{\rho} = \frac{(2s-\mu+1)(s!)^3}{(s-\mu)!},$$

lequel intervient dans la normalisation de la partie radiale des fonctions d'onde.

Chapitre 2. Équations différentielles

En mécanique classique, le moment cinétique de l'électron est donné par l'expression

$$\vec{\mathcal{L}} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (2.350)$$

En mécanique quantique, cette quantité physique devient, *via* le principe de correspondance, l'observable \mathbf{L} :

$$\vec{\mathcal{L}} \rightarrow \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (2.351)$$

où $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ est la quantité de mouvement en mécanique quantique. Le produit vectoriel conduit aux expressions des composantes du moment cinétique en représentation position :

$$L_x = \frac{\hbar}{i}(y\partial_z - z\partial_y), \quad (2.352)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i}(z\partial_x - x\partial_z), \quad (2.353)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}(x\partial_y - y\partial_x). \quad (2.354)$$

La transformation de ces expressions en coordonnées sphériques est effectuée avec les relations suivantes entre coordonnées cartésiennes et sphériques :

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad (2.355)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi, \quad (2.356)$$

$$z = r \cos \theta, \quad (2.357)$$

et

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad (2.358)$$

$$\theta = \arccos \frac{z}{r}, \quad (2.359)$$

$$\phi = \arctan \frac{y}{x}. \quad (2.360)$$

Les dérivées sont quant à elles reliées par la transformation :

$$\partial_i = \partial_i r \partial_r + \partial_i \theta \partial_\theta + \partial_i \phi \partial_\phi, \quad (2.361)$$

où $i = x, y, z$. Quelques manipulations algébriques permettent d'obtenir sans difficulté :

$$\partial_x = \sin \theta \cos \phi \partial_r + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \partial_\theta - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \partial_\phi, \quad (2.362)$$

$$\partial_y = \sin \theta \sin \phi \partial_r + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \partial_\theta + \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \partial_\phi, \quad (2.363)$$

$$\partial_z = \cos \theta \partial_r - \frac{1}{r} \sin \theta \partial_\theta. \quad (2.364)$$

La substitution des dérivées dans (2.352-2.354) conduit aux composantes de \mathbf{L} en coordonnées sphériques :

$$L_x = \frac{\hbar}{i}(-\sin \phi \partial_\theta - \cot \theta \cos \phi \partial_\phi), \quad (2.365)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i}(-\cos \phi \partial_\theta + \sin \phi \cot \theta \partial_\phi), \quad (2.366)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \partial_\phi. \quad (2.367)$$

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

Après quelques manipulations algébriques, le carré du moment cinétique devient

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right), \end{aligned} \quad (2.368)$$

qui est donc un opérateur différentiel du second ordre *indépendant* de la variable radiale r .

Considérons alors l'équation Sturm-Liouville :

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 \bar{Y}_\lambda(\Omega) &= \lambda \hbar^2 \bar{Y}_\lambda(\Omega), \\ -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \bar{Y}_\lambda(\Omega) &= \lambda \hbar^2 \bar{Y}_\lambda(\Omega) \end{aligned} \quad (2.369)$$

exprimée en termes de l'angle solide $\Omega = (\theta, \phi)$; λ est la valeur propre sans dimension et $\bar{Y}_\lambda(\Omega)$, la fonction propre correspondante, qui sera prise normalisée,

$$\int \bar{Y}_\lambda^*(\Omega) \bar{Y}_\lambda(\Omega) d\Omega = 1, \quad (2.370)$$

avec $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$. Si on regarde l'expression

$$\begin{aligned} \int \bar{Y}_\lambda^*(\Omega) \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} \bar{Y}_\lambda(\Omega) d\Omega &= \int (\mathbf{L} \bar{Y}_\lambda(\Omega))^* \cdot (\mathbf{L} \bar{Y}_\lambda(\Omega)) d\Omega \\ &= \lambda \hbar^2 \geq 0, \end{aligned} \quad (2.371)$$

on en conclut que si \mathbf{L} est un opérateur hermitique ($\mathbf{L} = \mathbf{L}^*$), la valeur propre λ est nécessairement positive ou nulle. On posera donc

$$\lambda \equiv \bar{\ell}(\bar{\ell} + 1), \quad (2.372)$$

où $\bar{\ell} \geq 0$.¹³

Si on revient maintenant à l'équation (2.281) régissant les harmoniques sphériques, on a selon λ_1 trouvée en (2.296), l'équation aux valeurs propres :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_\ell^m(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_\ell^m(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} &= \ell(\ell + 1) Y_\ell^m(\theta, \phi), \\ \times \hbar^2 : \quad -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) Y_\ell^m(\theta, \phi) &= \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_\ell^m(\theta, \phi), \\ \mathbf{L}^2 Y_\ell^m(\theta, \phi) &= \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_\ell^m(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (2.373)$$

laquelle coïncide avec l'équation aux valeurs propres de \mathbf{L}^2 en (2.369). On démontre ainsi la correspondance suivante :

$$\bar{\ell} \equiv \ell = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.374)$$

$$\bar{Y}_\lambda(\Omega) \equiv Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (2.375)$$

13. L'égalité (2.372) s'établit par le fait que l'équation qui en découle,

$$\bar{\ell}^2 + \bar{\ell} - \lambda = 0,$$

admet comme racines

$$\bar{\ell}_\pm = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4\lambda},$$

soit une seule racine positive, $\bar{\ell}_+$, pour chaque λ positif, ce qui établit (2.372).

Finalement, à partir de l'expression de L_z en (2.367) et l'expression des harmoniques sphériques (2.373), il est aisé de vérifier l'équation aux valeurs propres de L_z :

$$L_z Y_\ell^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (2.376)$$

Selon (2.373) et (2.376), il résulte donc que les harmoniques sphériques, $\{Y_\ell^m(\theta, \phi)\}$, sont à la fois fonctions propres de L^2 et de L_z avec les valeurs propres *quantifiées* respectives $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ et $m\hbar$. Comme la valeur de m doit satisfaire $\ell \geq m$ [cf. (2.297)], il s'ensuit qu'il existe $2\ell + 1$ harmoniques sphériques indépendantes pour chaque valeur de ℓ :

$$Y_\ell^{-m}(\theta, \phi), Y_\ell^{-m+1}(\theta, \phi) \dots Y_\ell^0(\theta, \phi), Y_\ell^1(\theta, \phi), \dots, Y_\ell^{m-1}(\theta, \phi), Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (2.377)$$

Le nombre $2\ell + 1$ correspond aux nombres de projections possibles (valeurs propres $m\hbar$) du moment cinétique L_z pour un ℓ donné.

Fonctions propres et orbitales de l'hydrogène atomique

On est en position d'exprimer les fonctions propres ou orbitales de l'atome d'hydrogène en fonction de l'énergie E_n telle que donnée en (2.340). Ainsi, le *niveau fondamental* d'énergie la plus basse correspond à la valeur minimale prise par n , soit $n = 1$ avec l'énergie $E_1 = -E_I \approx -13.6\text{eV}$. Si la valeur minimale prise par k est $k = 1$, alors on doit avoir obligatoirement $\ell = 0$, et par conséquent $m = 0$. Avec la triade de nombres quantiques $(n, \ell, m) \rightarrow (1, 0, 0)$, l'expression de la fonction d'onde du fondamental devient selon (2.349) et (2.313),

$$\begin{aligned} \varphi_{1,0,0}(r, \theta, \phi) &= 2 \frac{1}{(na_0)^{3/2}} L_1^1(2r/a_0) e^{-r/a_0} Y_0^0(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} e^{-r/a_0} \quad (1s) \end{aligned} \quad (2.378)$$

qui décrit un nuage d'amplitude de probabilité sans noeuds et décroissant exponentiellement en fonction de la distance. Cette orbitale est appelée '1s' (s pour *sharp*) et est non dégénérée : une seule fonction d'onde est associée à l'énergie du fondamental. Le niveau de dégénérescence $g = 1$.

Si on passe au premier niveau excité, soit $n = 2$ ayant comme énergie $E_2 = -E_I/2^2$. Selon (2.340), il y a alors deux couples de valeurs (ℓ, k) possibles conduisant à $n = 2$, soit $(0, 2)$ et $(1, 1)$. Dans le premier cas, nous avons en vertu de (2.297), $\ell = 0$ et donc $m = 0$, ce qui donne à partir de (2.349), (2.346) et (2.313),

$$\begin{aligned} \varphi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) &= \sqrt{\frac{1}{4(2a_0)^3}} L_2^1(r/a_0) e^{-r/(2a_0)} Y_0^0(\theta, \phi) \\ &= \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}} [1 - r/(2a_0)] e^{-r/(2a_0)}, \quad (2s). \end{aligned} \quad (2.379)$$

qui est également un niveau à symétrie sphérique avec cependant un noeud à $r = 2a_0$. C'est le niveau 2s. Pour le deuxième couple de nombres quantiques $(1, 1)$, $\ell = 1$ donnera trois possibilités de projection pour L_z , soit

2.3. Équations différentielles et conditions aux limites : le problème de Sturm-Liouville

−1, 0, et 1. Selon (2.349), (2.346) et (2.314-2.315), les trois fonctions d'onde prennent la forme

$$\begin{aligned}\varphi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi) &= \sqrt{\frac{4}{2(2a_0)^3 6^3}} L_3^3(r/a_0) \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/(2a_0)} Y_1^{-1}(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{8} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \sin \theta e^{-i\phi}, \quad (2p_{-1});\end{aligned}\tag{2.380}$$

$$\begin{aligned}\varphi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) &= \sqrt{\frac{4}{2(2a_0)^3 6^3}} L_3^3(r/a_0) \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/(2a_0)} Y_1^0(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \cos \theta, \quad (2p_z);\end{aligned}\tag{2.381}$$

$$\begin{aligned}\varphi_{2,1,+1}(r, \theta, \phi) &= \sqrt{\frac{4}{2(2a_0)^3 6^3}} L_3^3(r/a_0) \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/(2a_0)} Y_1^1(\theta, \phi) \\ &= -\frac{1}{8} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \sin \theta e^{+i\phi}, \quad (2p_{+1}).\end{aligned}\tag{2.382}$$

Ces fonctions d'onde correspondent respectivement aux orbitales $2p_{-1}$, $2p_z$, et $2p_{+1}$ (p pour *principal*). Les orbitales $2s$, $2p_z$ et $2p_{\pm 1}$ appartiennent au même niveau d'énergie $n = 2$, ce qui entraîne une dégénérescence $g = 4$.

Bibliographie

- [1] *Mathematical methods for physicists, sixth edition*, G. B. Arfken and H. J. Weber, Elsevier (2005).
- [2] *Mathematical methods for physics and engineering, seconde édition*, K. F. Riley, M. P. Hobson et S. J. Bence, Cambridge (2002).
- [3] *Methods of Theoretical Physics*, P. M. Morse and H. Feshbach, McGraw-Hill, Parts I and II (1953).
- [4] *Variables complexes*, M. R. Spiegel, Série Schaum, McGraw-Hill (1976).
- [5] *Graduate Mathematical Physics*, James. J. Kelly, Wiley-VCH, (2006).
- [6] *Physics and mathematical tools : methods and examples*, Angel Alastuey, Maxime Clusel, Marc Magro, Pierre Pujo, edp Sciences, World Scientific (2016).
- [7] *Mathematical Methods in the Physical Sciences, third edition*, Mary L. Boas, Wiley (2006).
- [8] *Mathematical Physics*, Eugene Butkov, Addison-Wesley (1968).
- [9] *Mathematical Physics, a modern introduction to its foundations*, Sadri Hassani, Springer (2006).
- [10] *Mathematical methods for physicists, a concise introduction*, Tai L. Chow, Cambridge university press (2000).
- [11] *A guided tour of mathematical methods for the physical sciences, second edition*, Roel Snieder, Cambridge (2004).
- [12] *Basic Training in Mathematics, a Fitness Program for Science Students*, R. Shankar, Plenum Press, New York (1995).
- [13] *Differential Equations with applications and historical notes*, G. F. Simmons, Int. series in pure and applied mathematics, McGraw Hill, (1972).
- [14] *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, Mathematical Tables*, M. Abramowitz and I. Stegun, Dover (1972).
- [15] *Méthodes de physique théorique : Notes de cours*, L. G. Caron, Université de Sherbrooke (2005).