

Astérisque

JACQUES HARTHONG

Étude macrocausale de la diffusion (1978)

Astérisque, tome 111 (1984), p. 53-89

http://www.numdam.org/item?id=AST_1984__111__53_0

© Société mathématique de France, 1984, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la collection « Astérisque » (<http://smf4.emath.fr/Publications/Asterisque/>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques

<http://www.numdam.org/>

**ETUDE MACROCAUSALE
DE LA DIFFUSION**

(1978)

I. - LE PRINCIPE DE MACROCAUSALITÉ.

1. La méthode de la phase stationnaire. Considérons une intégrale oscillante dépendant d'un paramètre :

$$I(\tau) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\tau\omega(p)} \bar{\Phi}(p) dp$$

où $\omega \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ et $\bar{\Phi} \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^n)$. Si ω possède un seul point critique p_0 dans le support de $\bar{\Phi}$ et si ce point critique est non-dégénéré, on a le développement asymptotique, lorsque $\tau \rightarrow \infty$:

$$I(\tau) = \left(\frac{2\pi}{\tau}\right)^{\frac{n}{2}} e^{i\sigma\frac{\pi}{4}} |\det \text{hess } \omega(p_0)|^{-\frac{1}{2}} \bar{\Phi}(p_0) e^{i\tau\omega(p_0)} [1 + o\left(\frac{1}{\tau}\right)]$$

Si ω ne possède aucun point critique dans le support de $\bar{\Phi}$, $I(\tau)$ décroît plus rapidement que toutes les puissances lorsque $\tau \rightarrow \infty$.

2. Application à une forme élémentaire du principe de macrocausalité (non relativiste) .

Soit $\bar{\Phi} \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^3)$ une fonction d'état en représentation d'impulsion. Une particule libre dont l'état (à l'instant $t = 0$) est décrit par $\bar{\Phi}$ aura pour fonction d'onde

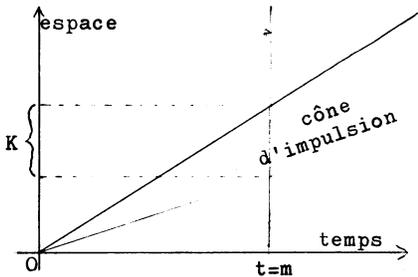
$$\psi(t, x) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^2}{2m} t - p \cdot x \right]} \bar{\Phi}(p) dp \quad (1)$$

C'est en effet la solution de l'équation de Schrödinger libre $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$ avec condition initiale $\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \bar{\Phi}(p) dp$ (transformée de Fourier de $\bar{\Phi}$) . D'après la formule de Plancherel, on a pour tout t :

$$\int |\psi(t, x)|^2 dx = \int |\bar{\Phi}(p)|^2 dp = 1 \quad (2)$$

Les principes fondamentaux de la mécanique ondulatoire nous font interpréter $|\Psi(t,x)|^2$ comme la densité de probabilité de trouver la particule au point x à l'instant t , tandis que $|\Phi(p)|^2$ est la densité de probabilité de lui trouver l'impulsion p (indépendante du temps pour une particule libre). Rappelons l'hypothèse fondamentale de la diffusion: les états initiaux et finaux de diffusion sont des états libres, au moins pour les situations où le potentiel décroît assez vite à l'infini.

Supposons donc tout d'abord que $\Phi(p)$ soit une fonction de carré intégrable et à support compact K . Cela veut dire que la probabilité pour la particule d'avoir une impulsion à l'extérieur de K est nulle. On peut appliquer la méthode de la phase stationnaire à l'intégrale de Fourier qui donne $\Psi(t,x)$: soit, dans l'espace-temps, le cône $C_K = \{ (t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \mid \exists \tau > 0 \exists p_0 \in K (t,x) = (\tau m, \tau p_0) \}$; c'est le cône de sommet 0 et de base K . Nous



appellerons ce cône le "cône d'impulsion".

On peut donc écrire, pour $t = \tau m$ et

$$x = \tau p_0 :$$

$$\begin{aligned} \Psi(t,x) &= (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{i}{\hbar}\tau(\frac{p^2}{2} - p \cdot p_0)} \Phi(p) dp \\ &= \tau^{-\frac{3}{2}} e^{-i\frac{3\pi}{4}} \Phi(p_0) e^{-\frac{i}{\hbar}p_0^2\tau} [1 + O(\frac{1}{\tau})] \end{aligned} \quad (3)$$

lorsque $p_0 \in K$; bien entendu, si $p_0 \notin K$,

$\Psi(t,x)$ décroît rapidement (plus vite que toutes les puissances). On en déduit que lorsque τ tend vers l'infini,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{C_K} |\Psi(\tau m, x)|^2 dx = 1$$

autrement dit que pour t infiniment grand, la particule est sûrement dans le cône d'impulsion C_K .

Il n'est pas nécessaire de supposer que $\Phi(p)$ est à support compact : en appliquant exactement le même raisonnement, on pourra voir que la densité de probabilité de trouver la particule dans la direction de p_0 , mais à une distance infiniment grande et au bout d'un temps infiniment grand, est égale à $|\Phi(p_0)|^2$. C'est ce qui justifie le terme de "macrocausalité" : la particule, pourvu que le cône C_K soit très étroit, a un mouvement identique à celui qui est décrit par la mécanique classique, à condition qu'elle soit observée à une échelle macroscopique, c'est-à-dire pour des distances et des temps infiniment grands.

Plus généralement, nous parlerons de macrocausalité au sens suivant : connaissant la fonction d'état d'un système, nous pouvons prédire sa position dans l'espace-temps à l'échelle macroscopique (la prédire à l'échelle microscopique est impossible d'après le principe d'incertitude de Heisenberg ; voir à ce sujet la discussion à la fin du chapitre III) . Dans ce travail, nous ne parlerons pas de situations relativistes, où la notion de "probabilité de présence", sur laquelle repose celle de macrocausalité, est moins claire que dans le cas non relativiste. Mais c'est dans les situations relativistes que les idées se sont précisées sur ce problème (c'est D. Ruelle, dans un article paru en 1962, qui a adapté les méthodes ci-dessus au cas relativiste [17] . Puis une longue série de travaux a peu à peu dégagé les idées dont on trouvera une synthèse dans le livre de IAGOLNITZER [10] et dont nous donnerons au chapitre III une application inédite) .

Dans la section suivante, nous allons tenter d'expliquer simplement les résultats qui nous sont nécessaires (et nous renvoyons le lecteur aux références [3] et [10] pour en savoir plus) .

4. Macrocausalité et microanalyticité. En gros, l'idée que nous voudrions exploiter plus loin, est la suivante : mathématiquement, la macrocausalité s'exprime par un comportement asymptotique, lorsque le temps et la distance tendent vers l'infini, de la fonction d'onde $\psi(t,x)$. Par exemple, une décroissance exponentielle dans un cône de directions signifiera que, macroscopiquement, le système ne pourra pas être observé dans ce cône. Or, les propriétés à l'infini (pour être plus précis : le comportement asymptotique suivant chaque direction de l'espace-temps) de la fonction d'onde $\psi(t,x)$ sont reliées aux propriétés microanalytiques de la fonction d'état $\hat{\psi}(p)$. Pour donner une expression précise à cette idée un peu vague, nous allons commencer par une étude la transformation de Fourier.

Voici tout d'abord une situation simple : soit C un cône convexe dans \mathbb{R}^n , et f une fonction dans $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, à support contenu dans C . Alors il est facile de voir que la transformée de Fourier

$$\hat{f}(\xi) = (2\pi)^{-n} \int_C e^{ix \cdot \xi} f(x) dx$$

se prolonge en une fonction analytique dans $\mathbb{R}^n + i\hat{C}$, où \hat{C} est le cône dual (1) de C .

Ceci était élémentaire. Voyons maintenant ce qu'il est possible de faire si C est un ensemble convexe, non nécessairement conique, mais adhérent à l'origine. Cette fois, nous devons supposer que f a la propriété suivante par rapport à C :

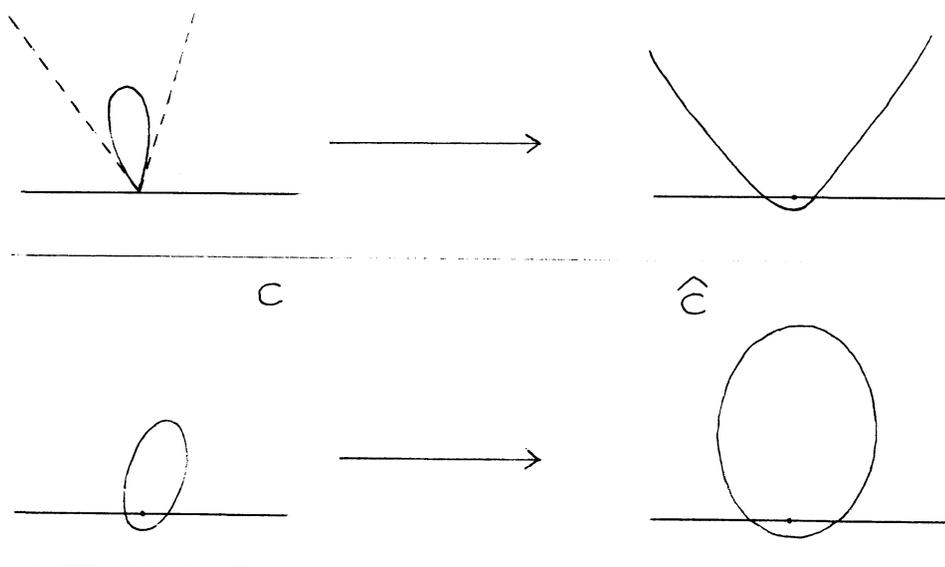
$$\forall \epsilon > 0 \exists C_\epsilon > 0 \forall x \in C \quad |f(x)| \leq C_\epsilon e^{-(1-\epsilon)\beta(x)} \quad (5)$$

(1) le cône dual \hat{C} est le cône formé par l'ensemble des $y \in \mathbb{R}^n$ pour lesquels $\forall x \in C, x \cdot y \geq 0$.

où $\beta(x) = \frac{|x|}{\hat{C}}$, \hat{C} étant le point (unique puisque C est convexe) à l'intersection de la demi-droite issue de l'origine et passant par x , avec la frontière de C . En langage clair, cela veut dire que f est égale à 0 en dehors du cône tangent (à l'origine) à $C^{(2)}$, et décroît exponentiellement en dehors de C dans les directions intérieures à ce cône. Nous résumerons ces propriétés en disant que le support essentiel de f est contenu dans C . (Ainsi, le support essentiel est défini comme le plus petit convexe fermé à l'extérieur duquel l'inégalité (5) est vérifiée). Puis, nous introduisons l'ensemble polaire \hat{C} de C :

$$\hat{C} = \{ \xi \in \mathbb{R}^n \mid \forall x \in C, x \cdot \xi \geq -1 \} \quad (6)$$

On voit facilement que $\hat{\hat{C}} = C$ (si C est fermé et convexe) et que, si C est borné, l'origine est à l'intérieur de \hat{C} et vice-versa, que si C est non borné et possède un cône asymptote C_∞ à l'infini, \hat{C} aura l'origine sur sa frontière, avec un cône tangent en 0 égal au cône dual de C_∞ (situation en "wedge")



(2) si celui-ci existe. Mais nous pouvons convenir qu'il est égal à \mathbb{R}^n tout entier lorsqu'il est mal défini (i.e. si l'origine est à l'intérieur de C).

Nous pouvons maintenant énoncer un résultat (élémentaire) .

PROPOSITION. Si $f \in \mathcal{G}(\mathbb{R}^n)$ et si C est son support essentiel, alors $\hat{f}(\xi + i\eta)$ est analytique dans $\{\xi + i\eta \mid \eta \in \hat{C}\}$. Il va de soi qu'en outre $\hat{f}(\xi + i\eta)$ décroît rapidement lorsque ξ tend vers l'infini. (On a une proposition analogue pour les distributions $f \in \mathcal{G}'(\mathbb{R}^n)$. Evidemment \hat{f} ne décroît plus quand $|\xi| \rightarrow \infty$) .

La démonstration se devine aisément.

Nous n'avons exposé ces propriétés simples que pour mieux situer les propriétés beaucoup moins élémentaires qui vont suivre. Nous voudrions localiser les propriétés ci-dessus : $\hat{f}(\xi + i\eta)$ est analytique dans un "tube" invariant par les translations réelles. Comment tenir compte de l'analyticit  dans un "tube local" ? Pour cela, en suivant [3] nous allons d'abord d finir en toute pr cision ce que nous pouvons raisonnablement entendre par "tube local". Donnons-nous un ensemble ferm  et convexe, C , qui sera la base du tube local. Ce dernier sera alors la composante connexe contenant 0 de l'ensemble :

$$T_{C,0}^\epsilon = \{\xi + i\eta \mid \rho + r(\omega)(|\xi|^2 - \rho^2 - \epsilon^2) < 0\} \quad (7)$$

o  l'on repr sente $\eta = \rho\omega$ en coordonn es sph riques ($|\omega| = 1$) et $\rho = r(\omega)$ est l' quation de la fronti re de C ($\eta \in C \Leftrightarrow \rho \leq r(\omega)$) . On aura  galement, moyennant une translation, des tubes locaux au voisinage d'un point ξ_0 quelconque : ce sera la composante connexe contenant ξ_0 de l'ensemble :

$$T_{C,\xi_0}^\epsilon = \{\xi(\epsilon + i\eta) \mid \rho + r(\omega)(|\xi - \xi_0|^2 - \rho^2 - \epsilon^2) < 0\} \quad (8)$$

On notera que la trace sur les r els de T_{C,ξ_0}^ϵ est la boule de centre ξ_0 et de rayon ϵ . Nous conseillons ici au lecteur de faire deux ou trois dessins pour se rendre compte par lui-m me de la nature de ces tubes locaux suivant que C entoure l'origine, est born , est en "wedge", etc. Voir aussi [3] , pages

158-162. On remarquera que nous simplifions l'exposé de Bros et Iagolnitzer pour n'en retenir que ce qui nous sera utile.

Après cette notion de tube local, nous avons également besoin d'une "transformation de Fourier" locale, qui est une invention des auteurs cités.

Soit $f \in \mathcal{G}(\mathbb{R}^n)$. La transformée de Fourier locale, au point x_0 , de la fonction $f(x)$ sera la fonction

$$\hat{f}_{\tau, x_0}(\xi) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix \cdot \xi - \tau |x-x_0|^2} f(x) dx \quad (9)$$

qui dépend du paramètre $\tau \geq 0$ (si $\tau = 0$, $\hat{f}(\xi)$ ne dépend plus de x_0 et se réduit à la transformée de Fourier usuelle). On voit instantanément comment cette transformation de Fourier locale s'étend aux distributions tempérées.

On déduira facilement de la formule d'inversion classique une formule d'inversion "locale":

$$\hat{f}(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} e^{-\tau |x-x_0|^2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix \cdot \xi} \hat{f}_{\tau, x_0}(\xi) d\xi \quad (10)$$

Nous pouvons maintenant énoncer

THEOREME (Bros, Iagolnitzer). Soit $f \in \mathcal{G}(\mathbb{R}^n)$. Pour que f soit au voisinage de $\xi_0 \in \mathbb{R}^n$ la valeur au bord d'une fonction analytique à l'intérieur d'un tube local T_{B, ξ_0}^c de base B , il faut et il suffit que sa transformée de Fourier locale vérifie l'inégalité

$$|\hat{f}_{\tau, \xi_0}(x)| \leq \frac{C_N}{(1+\tau+|x|)^N} e^{-\tau} \quad (11)$$

pour tout N entier et pour tous les $(x, \tau) \notin S_B^0$, et aussi que $\forall \tau > 0, \hat{f}_{\tau, \xi_0} \in \mathcal{G}(\mathbb{R}^n)$. (S_B désigne le cône de base \hat{B} , ensemble polaire de B , c'est-à-dire :

$$S_B = \{(x, \tau) \mid \tau > 0, \frac{x}{\tau} \in \hat{B}\} \subset \mathbb{R}^{n+1}$$

et S_B^0 son intérieur). Il revient au même d'écrire, que pour tout x extérieur à \hat{B} ou situé sur sa frontière, on a pour tout $N \in \mathbb{N}$ une constante C_N telle que

$$|\hat{f}_{\tau, \xi_0}(\tau x)| \leq \frac{C_N}{1+\tau^N} e^{-\tau} \quad (12)$$

Nous exprimerons cette propriété en disant que S_B contient le support essentiel de \hat{f}_{τ, ξ_0} .

La démonstration de ce théorème, quoique reposant en fin de compte sur les mêmes principes, est beaucoup moins élémentaire que pour les situations précédentes. (voir [3] pages 169-176)

Ce théorème reste valide pour $f \in \mathcal{U}'(\mathbb{R}^n)$ (distribution tempérée) mais on prendra la transformée de Fourier locale de χf au lieu de f , où χ est une fonction indéfiniment dérivable à support dans un voisinage assez petit de ξ_0 , et analytique dans un voisinage encore plus petit de ξ_0 (cf. [10] pages 127-129).

II. - DIFFUSION A SYMÉTRIE SPHÉRIQUE.

1. On supposera dans cette section que le potentiel $V(x)$ ne dépend que de la distance à l'origine $r = |x|$. Dans ce cas, les opérateurs et les noyaux sont invariants par les rotations autour de l'origine. Les problèmes se réduisent alors à une seule variable. Nous allons profiter de cet avantage pour découvrir sans trop de peine un grand nombre de propriétés et tout particulièrement les propriétés d'analyticité du noyau $S(p, q)$ que nous interpréterons ensuite.

Commençons par rappeler les propriétés classiques que l'on pourra trouver dans [24] et [25] :

i) il existe une famille unique de fonctions de \mathbb{R}^3 dans \mathbb{C} , $x \mapsto \varphi(p, x)$ (indexée par $p \in \mathbb{R}^3$) vérifiant l'équation intégrale :

$$\varphi(p, x) - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i|p||x-y|}}{4\pi|x-y|} V(y)\varphi(p, y) dy = e^{ip \cdot x}$$

ou bien, ce qui est équivalent :

$$\begin{cases} |p|^2 \varphi(p, x) + \Delta^{(x)} \varphi(p, x) = V(x)\varphi(p, x) \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} [\varphi(p, x) - e^{ip \cdot x}] = 0 \end{cases}$$

Autrement dit, $\varphi(p, x)$ est la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, qui se comporte à l'infini comme $e^{ip \cdot x}$.

ii) De même que les $e^{ip \cdot x}$ définissent la transformation de Fourier, les $\varphi(p, x)$ définissent une isométrie de $L^2(\mathbb{R}^3)$ dans lui-même :

$$f \mapsto \hat{f}, \quad \text{avec} \quad \hat{f}(p) = (2\pi)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} f(x) \overline{\varphi(p, x)} dx$$

et on a la formule d'inversion :

$$f(x) = (2\pi)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{f}(p) \varphi(p, x) dp$$

Lorsque $V = 0$, cette transformation est la transformation de Fourier usuelle.

iii) Les fonctions $\varphi(p, x)$ ont, pour $|x| \rightarrow \infty$, le comportement asymptotique suivant:

$$\varphi(p, x) = e^{ip \cdot x} + A(p, x) \frac{e^{i|p||x|}}{|x|} + o\left(\frac{1}{|x|^2}\right)$$

avec $A(p, x) = \int_{\mathbb{R}^3} V(y) \varphi(p, y) e^{-i \frac{|p|}{|x|} x \cdot y} dy$

iv) Le noyau $S(p, q)$ est une distribution à support dans la variété (hypersurface de $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ $\{p^2 = q^2\}$ qui se factorise en

$$S(p, q) = \delta(p - q) - 2i\pi \delta(p^2 - q^2) T(p, q) \quad \text{où} \quad T(p, q) = \int V(x) \varphi(p, x) e^{-iq \cdot x} dx .$$

On remarquera que $A(p, x) = -2\pi^2 T(p, \frac{|p|}{|x|} x)$.

2. Les premières conséquences de la symétrie sphérique sont la réduction, pour les diverses fonctions, du nombre de variables.

Ainsi :

- $\varphi(p, x)$ ne dépend que de $k = |p|$, $r = |x|$ et $\cos \theta$, où θ est l'angle entre p et x . Nous noterons dans la suite $x = ru$, $p = k\alpha$ avec u et α appartenant à la sphère unité ; alors $\cos \theta = \alpha \cdot u$.

- $T(p, q)$, sur l'hypersurface $p^2 = q^2 = k^2$, ne dépend que de k et de $\alpha \cdot \beta$, où $p = k\alpha$ et $q = k\beta$.

On peut donc développer φ et T en séries de polynômes de Legendre ;

$$\varphi(p, x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \varphi_{\ell}(k, r) P_{\ell}(\alpha \cdot u) \quad (1)$$

$$T(p, q) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) T_{\ell}(k) P_{\ell}(\alpha \cdot \beta) \quad (2)$$

(1) est à rapprocher de la formule classique :

$$e^{ip \cdot x} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\alpha \cdot u) \quad (3)$$

où les $j_{\ell}(\xi)$ sont les fonctions de Bessel sphériques :

$$j_{\ell}(\xi) = \left(\frac{\pi}{2\xi}\right)^{\frac{1}{2}} j_{\ell+\frac{1}{2}}(\xi) \quad (4)$$

qui sont les solutions régulières des équations

$$j_{\ell}'' + \frac{2}{\xi} j_{\ell}' + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2}\right] j_{\ell} = 0 \quad (5)$$

Par le changement de variable $\xi = kr$, (5) devient :

$$b_{\ell}'' + \frac{2}{r} b_{\ell}' + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] b_{\ell} = 0 \quad (6)$$

qui est simplement l'équation radiale de l'équation de Schrödinger libre $k^2\psi + \Delta\psi = 0$. Les φ_{ℓ} sont solutions de l'équation radiale non libre :

$$\varphi_{\ell}'' + \frac{2}{r} \varphi_{\ell}' + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] \varphi_{\ell} = V\varphi_{\ell} \quad (7)$$

La comparaison de (6) et (7) nous donnera, par des méthodes de perturbation, les propriétés des fonctions $\varphi_{\ell}(k,r)$ et par conséquent celles de

$\varphi(p,x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\varphi_{\ell}(k,r) P_{\ell}(\alpha.u)$. Remarquons toutefois que la comparaison entre (6) et (7) n'a de sens que pour des solutions ayant même comportement

asymptotique là où V est petit, c'est-à-dire à l'infini. Ainsi, à chaque solution $b_{\ell}(kr)$ de l'équation radiale libre est associée univoquement la solution de l'équation radiale avec potentiel qui a le même comportement à l'infini.

Donc, on aura pour chaque couple de solutions indépendantes de (6), un couple de solutions indépendantes de (7). Nous prendrons le couple des deux fonctions

de Hankel sphériques $h_{\ell}^{(1)}(kr)$, et noterons le couple associé $h_{V,\ell}^{(1)}(k,r)$ et $h_{V,\ell}^{(2)}(k,r)$; bien entendu, on pouvait aussi prendre le couple $j_{\ell}(kr)$ et

$n_{\ell}(kr)$ (n_{ℓ} : fonction de Neumann), mais attention ! rien ne garantit que

$j_{V,\ell}(k,r)$ est la solution régulière à l'origine de (7), car la comparaison a lieu à l'infini. Ce qui néanmoins reste vrai, c'est que la solution régulière

φ_{ℓ} , qui est celle que nous cherchons, est une combinaison linéaire de

$h_{V,\ell}^{(1)}(k,r)$ et $h_{V,\ell}^{(2)}(k,r)$:

$$\varphi_{\ell}(k, r) = C_{\ell}^{(1)}(k)h_{V, \ell}^{(1)}(k, r) + C_{\ell}^{(2)}(k)h_{V, \ell}^{(2)}(k, r) \quad (8)$$

(Rappelons le résultat de Bôcher selon lequel les solutions régulières forment un espace de dimension 1) . Dans cet esprit, nous pouvons énoncer les gros résultats de ce chapitre :

THÉORÈME

i) si $V(r)$ décroît à l'infini plus vite que $e^{-\mu r}$ (où μ est une certaine constante > 0) , il existe pour tout $k \in \mathbb{C}$ tel que $k \neq 0$ et $|\Im k| < \frac{1}{2} \mu$, deux solutions indépendantes de (7) , $h_{V, \ell}^{(1)}(k, r)$ et $h_{V, \ell}^{(2)}(k, r)$ qui se comportent à l'infini respectivement comme $h_{\ell}^{(1)}(kr)$ et $h_{\ell}^{(2)}(kr)$, c'est-à-dire comme $-i \frac{e^{ikr}}{kr} e^{-i\ell \frac{\pi}{2}}$ et $i \frac{e^{-ikr}}{kr} e^{i\ell \frac{\pi}{2}}$, et qui dépendent analytiquement de k dans le domaine. Le point $k = 0$ est un pôle d'ordre $\ell+1$. Les fonctions $C_{\ell}^{(1)}(k)$ et $C_{\ell}^{(2)}(k)$ sont analytiques dans le même domaine . (1)

ii) L'opérateur de diffusion S (la "matrice S ") , étant invariant par les rotations, se diagonalise suivant les harmoniques sphériques et la valeur propre associée à $Y_{\ell m}$ est notée $S_{\ell}(k)$ (elle dépend de k , mais pas de m) . On a alors :

$$S_{\ell}(k) = \frac{C_{\ell}^{(1)}(k)}{C_{\ell}^{(2)}(k)} \quad (9)$$

ce qui montre que dans $\{-\frac{1}{2} \mu < \Im k < +\frac{1}{2} \mu\}$, $S_{\ell}(k)$ est une fonction méromorphe de k . On a aussi les relations

$$S_{\ell}(\bar{k}) = \frac{1}{S_{\ell}(k)} \quad , \quad S_{\ell}(-k) = \frac{1}{S_{\ell}(k)} \quad (10)$$

(1) les fonctions $C_{\ell}^{(1)}(k)$ et $C_{\ell}^{(2)}(k)$ sont appelées fonctions de Jost.

iii) Les seuls pôles de $S_{\mathbf{k}}(k)$ dans le domaine $\{0 < \Im k < \frac{1}{2} \mu\}$ sont les $k_m = +i\sqrt{-E_n}$ où les E_n sont les valeurs propres (négatives) de l'opérateur $-\Delta + V$. Il n'y a pas de caractérisation simple pour les pôles situés dans $-\frac{1}{2} \mu < \Im k < 0$.

Les résultats exprimés dans ce théorème ont été, en gros, démontrés pour la première fois, de manière éparsée et partielle par R. Jost (1947) et T. REGGE (1958) principalement (voir [11], [16]). En fait, c'est la conclusion d'une lente maturation à laquelle ont contribué de nombreux auteurs au cours des années 40 et 50.

Démonstration.

i) Montrer l'existence et l'analyticité des $h_{V,\mathbf{k}}^{(1)}(k,r)$ et $h_{V,\mathbf{k}}^{(2)}(k,r)$ repose sur un pénible procédé d'itération. Nous connaissons toutes les solutions de $Bf = 0$, où B est l'opérateur $k^2 + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{k}(\mathbf{k}+1)}{r^2}$. Par la méthode dite de "variation des constantes", nous allons résoudre l'équation avec second membre $Bf = g$ à l'aide d'un noyau $K(r,s)$ à déterminer :

$$f(r) = f_0(r) + \int_r^\infty K(r,s)g(s)ds \quad (11)$$

où f_0 est telle que $Bf_0 = 0$

et nous obtiendrons alors la solution de $Bf = Vf$ à partir de l'opération intégrale

$$f(r) = f_0(r) + \int_r^\infty K(r,s)V(s)f(s)ds \quad (12)$$

qui nous donnera $f(r) = h_{V,\mathbf{k}}^{(j)}(k,r)$ si nous prenons $f_0(r) = h_{\mathbf{k}}^{(j)}(kr)$ ($j = 1,2$) et que nous allons résoudre par itération. Bien entendu, pour assurer la convergence de l'itération, des majorations du noyau $K(r,s)$ seront nécessaires.

Donc, 1ère étape, chercher $K(r,s)$. Appliquons l'opérateur B aux deux membres de (11) :

$$f(r) = f_0(r) + \int_r^\infty K(r,s)g(s)ds$$

$$f'(r) = f_0'(r) - K(r,r)g(r) + \int_r^\infty \frac{\partial K}{\partial r}(r,s)g(s)ds$$

On peut choisir K de telle façon que $K(r,r) = 0$; alors

$$f''(r) = f''_0(r) - \frac{\partial K}{\partial r}(r,r)g(r) + \int_r^\infty \frac{\partial^2 K}{\partial r^2}(r,s)g(s)ds$$

D'où $Bf(r) = Bf_0(r) - \frac{\partial K}{\partial r}(r,r)g(r) + \int_r^\infty B^{(r)}K(r,s)g(s)ds$. Puisque $Bf_0 = 0$, il suffit, pour avoir $Bf = g$, que

$$K(r,r) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial K}{\partial r}(r,r) = -1$$

$$B^{(r)}K(r,s) = 0$$

Or, pour avoir $B^{(r)}K(r,s) = 0$, il faut et il suffit que pour tout s fixé, $K(r,s)$ soit une combinaison linéaire de deux solutions indépendantes de $Bf = 0$, par exemple de $j_\ell(kr)$ et $n_\ell(kr)$:

$$K(r,s) = A(s)j_\ell(kr) + B(s)n_\ell(kr)$$

et il ne reste plus qu'à déterminer $A(s)$ et $B(s)$ pour avoir $K(r,r) = 0$ et $\frac{\partial K}{\partial r}(r,r) = -1$ (Méthode de "variation des constantes") . Ce calcul facile nous donne, pour tout k réel ou complexe :

$$K(r,s) = \frac{1}{k} \frac{j_\ell(kr)n_\ell(ks) - j_\ell(ks)n_\ell(kr)}{j_\ell(ks)n'_\ell(ks) - j'_\ell(ks)n_\ell(ks)} \quad (13)$$

D'après un résultat classique, $j_\ell(\xi)n'_\ell(\xi) - j'_\ell(\xi)n_\ell(\xi) = \frac{1}{\xi^2}$ et par conséquent :

$$K(r,s) = ks^2 [j_\ell(kr)n_\ell(ks) - j_\ell(ks)n_\ell(kr)] \quad (14)$$

On peut majorer l'expression entre crochets par la formule des accroissements finis :

$$|[\dots]| \leq (s-r)|k| \sup_{r \leq u \leq s} (|j_\ell(kr)n'_\ell(ku)| + |j'_\ell(ku)n_\ell(kr)|) \quad \text{si } s \geq r$$

Puis, en utilisant les quatre majorations suivantes (que l'on obtient à partir du comportement des $j_\ell(\xi)$, $n_\ell(\xi)$ et leurs dérivées au voisinage de 0 et de l'infini) :

$$\begin{aligned}
 |j_{\ell}(kr)| &\leq C^{\text{te}} e^{|\mathfrak{A}nk|r} \left(\frac{|k|r}{1+|k|r}\right)^{\ell} \\
 |j'_{\ell}(kr)| &\leq C^{\text{te}} e^{|\mathfrak{A}nk|r} \left(\frac{|k|r}{1+|k|r}\right)^{\ell-1} \\
 |n_{\ell}(kr)| &\leq C^{\text{te}} e^{|\mathfrak{A}nk|r} \left(\frac{|k|r}{1+|k|r}\right)^{-\ell-1} \\
 |n'_{\ell}(kr)| &\leq C^{\text{te}} e^{|\mathfrak{A}nk|r} \left(\frac{|k|r}{1+|k|r}\right)^{-\ell-2}
 \end{aligned} \tag{15}$$

on parvient à la majoration pour $K(r,s)$ que voici :

$$|K(r,s)| \leq C^{\text{te}} e^{(s-r)(1+|x|s)^2} e^{|\mathfrak{A}nk|(r+s)} \left(\frac{|k|s}{1+|k|s}\right)^{\ell+1} \left(\frac{|k|r}{1+|k|r}\right)^{-\ell-1}$$

2eme étape, l'itération. Pour appliquer cette méthode bien connue, la première idée qui vient à l'esprit est de poser

$$f_1(k,r) = \int_r^{\infty} K(r,s)V(s)f_0(k,s)ds, \dots f_n(k,r) = \int_r^{\infty} K(r,s)V(s)f_{n-1}(k,s)ds,$$

et puis de remarquer que la série $\sum_{n=0}^{\infty} f_n(k,r)$ converge vers la solution cherchée.

Mais lorsque $\mathfrak{A}nk \neq 0$, il n'apparaît pas clairement que $f(k,r) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(k,r)$

et $f_0(k,r)$ ont le même comportement asymptotique à l'infini. C'est pourquoi

nous introduisons

$$g_0(k,r) = ikr e^{-ikr} e^{i\frac{\ell}{2}\frac{\pi}{2}} h_{\ell}^{(1)}(k,r)$$

ou bien
$$= -ikr e^{ikr} e^{-i\frac{\ell}{2}\frac{\pi}{2}} h_{\ell}^{(2)}(k,r)$$

selon que $f_0(k,r) = h_{\ell}^{(1)}(kr)$ ou $h_{\ell}^{(2)}(kr)$. Lorsque $r \rightarrow \infty$, $g_0(k,r) \rightarrow 1$.

En outre, si on pose

$$g(k,r) = ikr e^{-ikr} e^{i\frac{\ell}{2}\frac{\pi}{2}} f(k,r)$$

ou bien
$$= -ikr e^{ikr} e^{-i\frac{\ell}{2}\frac{\pi}{2}} f(k,r)$$

$g(k,r)$ est solution de l'équation intégrale :

$$g(k,r) = g_0(k,r) + \int_r^{\infty} \frac{r}{s} e^{ik(s-r)} K(r,s)V(s)g(k,s)ds$$

et le noyau de cette nouvelle équation vérifie l'inégalité (pour $r \leq s$) :

$$\left| \frac{r}{s} e^{ik(s-r)} K(r,s) \right| \leq Mr(1+|k|s)^2 e^{(|\Im k| - \Re k)s + (|\Im k| + \Re k)r} \left(\frac{|k|s}{1+|k|s} \right)^{\ell+1} \left(\frac{|k|r}{1+|k|r} \right)^{-\ell-1}$$

On remarquera que dans tous les cas de figure, $(|\Im k| - \Re k)s + (|\Im k| + \Re k)r \leq 2|\Im k|s$, si $r \leq s$.

Donc, si on pose $Y(k,r) = \int_r^\infty r(1+|k|s)^2 e^{2|\Im k|s} |v(s)| ds$, on voit que

$$\begin{aligned} |g_{n-1}(k,r)| &\leq M \left(\frac{|k|r}{1+|k|r} \right)^{-\ell-1} \frac{[MY(k,r)]^{n-1}}{(n-1)!} \cdot |k|r \\ &= |g_n(k,r)| \leq M \left(\frac{|k|r}{1+|k|r} \right)^{-\ell-1} \cdot \frac{[MY(k,r)]^n}{n!} \cdot |k|r \end{aligned}$$

et puisque $|g_0(k,r)| \leq M \left(\frac{|k|r}{1+|k|r} \right)^{-\ell-1} |k|r$ si on choisit bien M , on en déduit par récurrence que, pourvu que $\frac{Y(k,r)}{\infty} < \infty \forall r$, la série $\sum_{n=0}^\infty g_n$ converge, et aussi que $g(k,r) - g_0(k,r) = \sum_{n=1}^\infty g_n(k,r)$ tend vers 0 quand $r \rightarrow \infty$, ce qui montre que f existe et est équivalent, pour $r \rightarrow \infty$, à f_0 . En ce qui concerne l'analyticité, il suffit de remarquer que, si $v(r) \leq C^{te} \cdot e^{-\mu r}$, alors $Y(k,r)$ est majorable uniformément en k sur tout compact de la bande $-\frac{1}{2}\mu < \Re k < +\frac{1}{2}\mu$, et évidemment chacune des $g_n(k,r)$ est analytique dans cette bande, en dehors du point $k=0$. Enfin, la majoration par le facteur $\left(\frac{|k|r}{1+|k|r} \right)^{-\ell-1}$ montre immédiatement que $k=0$, est pour $g(k,r)$, donc aussi pour $f(k,r)$, un pôle (d'ordre ℓ pour g d'ordre $\ell+1$ pour f)

ii) On peut développer $A(p,x)$ en série de polynômes de Legendre :

$$A(p,x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) a_\ell(k) P_\ell(\alpha \cdot u)$$

(avec, toujours, $p = k\alpha$, $x = ru$). Evidemment $a_\ell(k) = -2\pi^2 T_\ell(k)$.

Puisque $S(p,q) = \delta(p-q) - 2i\pi \delta(p^2 - q^2) T(p,q)$, on a, en posant $\Phi_2 = S\Phi_0$:

$$\Phi_2(p) = \Phi_0(p) - 2i\pi \int_{\mathbb{R}^3} \delta(p^2 - q^2) T(p,q) \Phi_0(q) dq$$

Décomposons Φ_0 en série d'harmoniques sphériques :

$$\Phi_0(p) = \sum_{\ell, m} \Phi_0^{\ell m}(k) Y_{\ell m}(\alpha)$$

On a aussi :

$$T(p, q) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) T_{\ell}(k) P_{\ell}(\alpha \cdot \beta) = 4\pi \sum_{\ell, m} T_{\ell}(k) Y_{\ell m}(\alpha) \overline{Y_{\ell m}(\beta)}$$

d'où

$$\begin{aligned} \Phi_2(p) &= \sum_{\ell, m} \Phi_0^{\ell m}(k) Y_{\ell m}(\alpha) - \\ &- 2i\pi \int_0^{\infty} \int_S \delta(k^2 - m^2) m^2 \sum_{\ell, m} \sum_{\ell', m'} 4\pi T_{\ell'}(k) \Phi_0^{\ell m}(m) Y_{\ell' m'}(\alpha) \overline{Y_{\ell' m'}(\beta)} Y_{\ell m}(\beta) d\beta dm \\ &= \sum_{\ell, m} \Phi_0^{\ell m}(k) Y_{\ell m}(\alpha) - 2i\pi \int_0^{\infty} \delta(k^2 - s) \frac{1}{2s^2} \sum_{\ell, m} 4\pi T_{\ell}(k) \Phi_0^{\ell m}(\sqrt{s}) Y_{\ell m}(\alpha) ds \\ &= \sum_{\ell, m} \Phi_0^{\ell m}(k) Y_{\ell m}(\alpha) - 4i\pi^2 k \sum_{\ell, m} T_{\ell}(k) \Phi_0^{\ell m}(k) Y_{\ell m}(\alpha), \end{aligned}$$

ce qui montre que

$$\Phi_2^{\ell m}(k) = [1 - 4i\pi^2 k T_{\ell}(k)] \Phi_0^{\ell m}(k) = [1 + 2ik a_{\ell}(k)] \Phi_0^{\ell m}(k)$$

autrement dit que la valeur propre $S_{\ell}(k)$ de S associée à $Y_{\ell m}$ est

$$S_{\ell}(k) = 1 + 2ik a_{\ell}(k) \tag{16}$$

Nous allons maintenant montrer que $\frac{C_{\ell}^{(1)}(k)}{C_{\ell}^{(2)}(k)}$ est aussi égal à $1 + 2ik a_{\ell}(k)$, d'où nous déduirons évidemment ce que nous voulions. Pour cela, nous allons comparer les développements asymptotiques de $S_{\ell}(k, r)$ (lorsque $r \rightarrow \infty$) obtenus de deux manières différentes et identifier les coefficients.

1^{ère} manière : partons de la formule $\varphi(p, x) = e^{ip \cdot x} + A(p, x) \frac{e^{ikr}}{r} + O(\frac{1}{r^2})$ (léjà rappelée au début). En prenant les composantes radiales, cela donne

$$\varphi_{\ell}(k, r) = i^{\ell} j_{\ell}(kr) + a_{\ell}(k) \frac{e^{ikr}}{r} + O(\frac{1}{r^2})$$

Sachant que

$$j_{\ell}(kr) = \frac{-ie^{ikr} e^{-i\ell \frac{\pi}{2}} + ie^{-ikr} e^{-i\ell \frac{\pi}{2}}}{2kr} + o\left(\frac{1}{r^2}\right),$$

il vient

$$\varphi_{\ell}(k,r) = \left[-\frac{i}{2k} + a_{\ell}(k)\right] \frac{e^{ikr}}{r} + (-1)^{\ell} \frac{i}{2k} \frac{e^{-ikr}}{r} + o\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

2^e manière : on a aussi $\varphi_{\ell}(k,r) = C_{\ell}^{(1)}(k)h_{V,\ell}^{(1)}(k,r) + C_{\ell}^{(2)}(k)h_{V,\ell}^{(2)}(k,r)$.

Or, d'après i) $h_{V,\ell}^{(1)}(k,r) = h_{\ell}^{(1)}(k,r) + o(h_{\ell}^{(1)}(kr)) = i \frac{e^{ikr}}{kr} e^{-i\ell \frac{\pi}{2}} + o\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)$
 et de même pour $h_{V,\ell}^{(2)}(k,r)$. Donc

$$\varphi_{\ell}(k,r) = -ie^{i\ell \frac{\pi}{2}} C_{\ell}^{(1)}(k) \frac{e^{ikr}}{kr} + ie^{i\ell \frac{\pi}{2}} C_{\ell}^{(2)}(k) \frac{e^{-ikr}}{kr} + o\left(\frac{e^{|\Im k|r}}{r}\right).$$

Ceci étant vrai pour tout $k \neq 0$ tel que $-\frac{1}{2}\mu < \Im k < +\frac{1}{2}\mu$, on en déduit :

$$-\frac{i}{2k} + a_{\ell}(k) = -\frac{ie^{i\ell \frac{\pi}{2}}}{k} C_{\ell}^{(1)}(k)$$

$$(-1)^{\ell} \frac{i}{2k} = \frac{ie^{i\ell \frac{\pi}{2}}}{k} C_{\ell}^{(2)}(k)$$

d'où le résultat :

$$\frac{C_{\ell}^{(1)}(k)}{C_{\ell}^{(2)}(k)} = 1 + 2ik a_{\ell}(k)$$

Pour achever la preuve de ii) il reste à prouver les relations (10). Elles résultent immédiatement de relations analogues pour les $C_{\ell}^{(j)}(k)$ ($j = 1, 2$) que l'on obtient par les considérations suivantes :

a) les coefficients de l'équation $Bf = Vf$ sont réels pour k réel et les conditions asymptotiques pour $h_{V,\ell}^{(1)}(k,r)$ et $h_{V,\ell}^{(2)}$ sont conjuguées-complexes ; donc $h_{V,\ell}^{(1)}(\bar{k},r) = \overline{h_{V,\ell}^{(2)}(k,r)}$. De même, puisque la condition à l'origine de $\varphi_{\ell}(k,r)$ est réelle :

$$\varphi_{\ell}(\bar{k},r) = \overline{\varphi_{\ell}(k,r)}$$

ÉTUDE MACROCAUSALE DE LA DIFFUSION

b) B est invariant par $k \rightarrow -k$, et les conditions asymptotiques vérifient $h_{\ell}^{(1)}(-kr) = (-1)^{\ell} h_{\ell}^{(2)}(kr)$. Donc

$$\begin{aligned} \varphi_{\ell}(-k, r) &= \varphi_{\ell}(k, r) \\ h_{V, \ell}^{(1)}(-k, r) &= h_{V, \ell}^{(2)}(k, r) \cdot (-1)^{\ell} \end{aligned}$$

Toutes ces relations de symétrie entraînent :

$$\begin{cases} C_{\ell}^{(1)}(\bar{k}) = \overline{C_{\ell}^{(2)}(k)} \\ C_{\ell}^{(1)}(-k) = (-1)^{\ell} C_{\ell}^{(2)}(k) \end{cases} \quad (17)$$

d'où on déduit immédiatement (10).

iii) a) k_0 est un pôle de $S_{\ell}(k)$ seulement si c est un zéro de $C_{\ell}^{(2)}(k)$.

Nous avons donc à prouver :

$$C_{\ell}^{(2)}(k_0) = 0 \text{ et } \Im k_0 > 0 \Rightarrow k_0^2 \text{ est valeur propre.}$$

Or, si $C_{\ell}^{(2)}(k_0) = 0$, alors $\varphi_{\ell}(k_0, r) = C_{\ell}^{(1)}(k_0) h_{V, \ell}^{(1)}(k_0, r)$. D'après le comportement à l'infini de $h_{V, \ell}^{(1)}(k, r)$, on voit que, si $\Im k_0 > 0$, $\varphi_{\ell}(k_0, r)$ est à décroissance exponentielle, donc $\varphi_{\ell}(k_0, r) Y_{\ell m}(u)$ est dans $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}^3)$ et bien sûr, vérifie $(k_0^2 + \Delta - V) \cdot \varphi_{\ell}(k_0, r) Y_{\ell m}(u) = 0$. Autrement dit, il existe une fonction propre (et même plusieurs : une pour chaque valeur de m). Cela signifie que k_0^2 est valeur propre. Comme toute valeur propre de $-\Delta + V$ est réelle, cela entraîne que nécessairement k_0 est sur l'axe imaginaire.

b) Réciproque : si E_0 est valeur propre de $-\Delta + V$, posons $k_0 = i\sqrt{-E_0}$. Il faut montrer que $C_{\ell}^{(2)}(k_0) = 0$ et $C_{\ell}^{(1)}(k_0) \neq 0$ (c'est-à-dire que k_0 sera un pôle pour tous les $S_{\ell}(k)$, $\ell = 0, 1, \dots$). Il y a évidemment au moins une fonction propre φ associée à E_0 : $(k_0^2 + \Delta - V)\varphi = 0$ et $\varphi \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Développons φ en série d'harmoniques sphériques :

$\varphi(x) = \sum_{\ell, m} \varphi_{\ell}(r) Y_{\ell m}(u)$. Chacun des φ_{ℓ} vérifie $B\varphi_{\ell} = V\varphi_{\ell}$ et $\int_0^{\infty} r^2 |\varphi_{\ell}(r)|^2 dr < \infty$. Ces φ_{ℓ} sont des solutions régulières, donc (en choisissant la bonne normalisation) :

$$\varphi_{\ell}(r) = C_{\ell}^{(1)}(k_0) h_{V, \ell}^{(1)}(k_0, r) + C_{\ell}^{(2)}(k_0) h_{V, \ell}^{(2)}(k_0, r)$$

Compte tenu des comportements à l'infini de $h_{V, \ell}^{(1)}(k_0, r)$ et $h_{V, \ell}^{(2)}(k_0, r)$ et puisque $\Im k_0 > 0$, on ne peut avoir $\int_0^{\infty} r^2 |\varphi_{\ell}(r)|^2 dr < \infty$ que si $C_{\ell}^{(2)}(k_0) = 0$. D'autre part, on ne peut avoir $\varphi_{\ell} \neq 0$ que si $C_{\ell}^{(1)}(k_0) \neq 0$, d'où le résultat.

Remarques 1. On a montré en fait que si k_0 est un pôle pour l'un des $S_{\ell}(k)$, il l'est aussi pour toutes les autres valeurs de ℓ . Mais cela n'a plus aucune raison d'être vrai dans $\Im k < 0$.

2. Il n'y a pas de caractérisation simple pour les pôles dans $\Im k < 0$. Mais les relations (10) ou (17) montrent qu'ils ont nécessairement l'axe imaginaire pour axe de symétrie.

3. Le lecteur spécialiste de théorie spectrale et habitué à voir dans la théorie de la diffusion une application pure et simple des propriétés du spectre continu, sera peut-être surpris de nous voir oublier la mesure spectrale et tout fonder sur les propriétés analytiques des $S_{\ell}(k)$, d'autant plus que le lien entre ces deux points de vue est loin d'être direct. La raison de cette étude est la suivante : les grandeurs qui apparaissent ici, $S_{\ell}(k)$ et $a_{\ell}(k)$, sont liées de manière extrêmement simple, comme nous le verrons au chapitre suivant, aux grandeurs qui sont directement mesurables expérimentalement (alors qu'aucune expérience de physique ne peut permettre de voir la mesure spectrale sur un écran ou un graphique). C'est d'ailleurs ce qui justifiait aux yeux de Heisenberg l'introduction de ce concept de matrice S (voir [6] pp. 514-518). Ainsi, bien que les phénomènes physiquement significatifs dont nous parlerons au chapitre suivant (résonances principalement) soient lisibles sur la mesure spectrale, cette lecture exige un regard prodigieusement perçant

car le lien est compliqué et peu apparent ; le lecteur pourra le chercher, s'il est curieux, en calculant le noyau K de la partie continue de la mesure spectrale :

$$d \langle E(\lambda) f | g \rangle = \left(\int K(\lambda, x, y) f(x) \overline{f(y)} dx dy \right) d\lambda$$

à partir de la formule de Plancherel, puis ses composantes $K_{\ell}(\lambda, r, s)$ suivant les polynômes de Legendre ; il y verra effectivement une relation entre les zéros de $C_{\ell}^{(2)}(k)$ dont la partie imaginaire est négative et petite (résonances) et une brusque variation de phase dans le comportement asymptotique oscillant de $K_{\ell}(r, s)$ lorsque $r, s \rightarrow \infty$. Il conviendra qu'un effet de cet ordre reste très discret dans une expérience de diffusion ! Des effets considérablement plus tangibles seront étudiés au chapitre suivant.

4. Si on décompose $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C})$ en $\mathbb{L}^2([0, \infty[; \mathbb{L}^2(S^2))$ où S^2 est la sphère unité de \mathbb{R}^3 , l'opérateur de diffusion se représente comme la multiplication par un opérateur $S(k) : \mathbb{L}^2(S^2) \rightarrow \mathbb{L}^2(S^2)$ [i.e. $\tilde{\Phi}(k) \mapsto S(k) \cdot \tilde{\Phi}(k)$, où $\tilde{\Phi}(k) \in \mathbb{L}^2(S^2)$ avec $\tilde{\Phi}(k)(\alpha) = \Phi(k\alpha)$] ; pour tout $k > 0$, les valeurs propres de $S(k)$ sont évidemment les $S_{\ell}(k)$ (de multiplicité $2\ell+1$) ; l'application $k \mapsto S(k)$, à valeurs dans les opérateurs unitaires de $\mathbb{L}^2(S^2)$ se prolonge analytiquement dans $\{|\Im k| < \frac{\mu}{2}\}$ en une fonction méromorphe dont les pôles sont ceux des $S_{\ell}(k)$. Ce résultat doit être comparé à celui de LAX et PHILLIPS [12] qui étudiaient la diffusion par un obstacle réfléchissant. Que $S(k)$ soit méromorphe dans $\{|\Im k| < \frac{\mu}{2}\}$ est indépendant de la symétrie sphérique ; cette dernière nous a permis de diagonaliser $S(k)$ et donc d'étudier les pôles pour chaque valeur propre séparément.

III. INTERPRÉTATION DES RÉSULTATS.

1. La section efficace. Dans une expérience de diffusion, où l'on envoie un flux de particules incidentes sur une cible, la grandeur mesurable par excellence est le nombre de particules ayant diffusé (c'est-à-dire ayant interagi) rapporté au nombre de particules incidentes, mais aussi au nombre de noyaux qui constituent la cible : en effet, la cible (de l'hydrogène liquide par exemple) est formée d'un très grand nombre de noyaux atomiques, et si les conditions expérimentales sont bien homogènes, la quantité de particules diffusées sera proportionnelle à la densité en noyaux de la cible. Cette grandeur est la section efficace totale de diffusion. Si le flux incident est homogène (invariant par les translations d'espace-temps au moins dans la région occupée par la cible) , c'est-à-dire décrit approximativement par une onde plane monochromatique, le rapport qui constitue la section efficace est la même si on considère n'importe quelle portion de la surface que la cible présente aux particules incidentes, et la partie du flux incident qui frappe cette portion de surface ; autrement dit, la section efficace ne dépend que de l'intensité du flux incident (nombre de particules par unité de surface frappée) et de la densité de la cible (nombre de noyaux par unité de surface frappée). Sous les mêmes conditions (flux incident homogène), la section efficace est alors la probabilité conditionnelle pour qu'une particule soit diffusée par un noyau, sachant qu'elle est passée dans la zone d'influence de ce noyau et pas d'un autre ; cela résulte simplement de la loi des grands nombres.⁽¹⁾

On peut faire une analyse plus fine en mesurant le nombre de particules diffusées dans un cône de directions donné, également rapporté au nombre de particules incidentes et au nombre de noyaux de la cible.

(1) Rappelons que dans une expérience de diffusion, on suppose (hypothèse amplement justifiée par les distances gigantesques - en proportion de leurs régions d'interaction - qui séparent les noyaux) que les diffusions individuelles entre chaque particule incidente et le noyau qu'elle rencontre sont des événements indépendants.

Sous les mêmes conditions que ci-dessus, cette grandeur mesure la probabilité conditionnelle pour qu'une particule incidente soit diffusée dans un cône de directions, sachant qu'elle a interagi avec un seul noyau donné : c'est une fonction du cône de directions, ou, si l'on préfère, une mesure sur la sphère unité. La densité de cette mesure par rapport à la mesure uniforme est appelée la section efficace différentielle.

Nous voudrions maintenant relier cette grandeur de nature purement expérimentale aux grandeurs théoriques des chapitres précédents. Nous avons déjà soumis notre interprétation à une condition : que la fonction d'onde des particules incidentes soit aussi proche que possible de l'onde plane monochromatique, qui, nous l'avons vu, ne représente aucun état de particule. Mais on peut calculer la densité de probabilité de diffusion dans une direction donnée pour n'importe quel état initial, puis faire tendre ce dernier (non pas dans \mathbb{L}^2 évidemment, mais au sens des distributions) vers l'onde plane monochromatique. Si la probabilité ainsi calculée tend vers une limite, c'est cette limite que nous pourrions identifier à la grandeur expérimentale, à condition toutefois que de son côté l'expérimentateur utilise tout son art à obtenir des flux incidents suffisamment homogènes.

Soit donc $\Phi_0(p)$ la fonction d'état des particules incidentes (état initial), $\Phi_2(p)$ l'état final, et $\Phi_1 = \Phi_2 - \Phi_0$ l'état diffusé, de sorte que la fonction d'onde des particules diffusées est :

$$\psi_1(t, x) = (2\pi)^{\frac{3}{2}} \int e^{itp^2 - ix \cdot p} \Phi_1(p) dp$$

La probabilité de trouver la particule diffusée dans le cône C longtemps après l'interaction est par conséquent :

$$C^{te} \times \lim_{t \rightarrow \infty} \int_C |\psi_1(t, x)|^2 dx$$

où la C^{te} est déterminée par le choix d'une normalisation pour $\psi_0(t,x)$ ou, ce qui revient au même, pour $\Phi_0(p)$; en l'occurrence, puisque nous voulons la probabilité conditionnelle indiquée plus haut, la condition de normalisation va exprimer que la probabilité pour que la particule rencontre son noyau est égale à 1, c'est-à-dire que

$$C^{te} \times \int_V |\psi_0(t,x)|^2 dx = 1$$

où V est un cylindre de section unité parallèle à la direction du flux incident (soyons plus rigoureux : ceci n'a de sens qu'à la limite où ψ_0 tend vers l'onde plane monochromatique ; c'est donc $C^{te} \times \lim \int_V |\psi_0(t,x)|^2 dx = 1$).

Ce que nous venons de dire résulte simplement des principes (probabilistes) fondamentaux de la mécanique ondulatoire. En appliquant aussi le principe de macrocausalité sous sa forme la plus élémentaire (section 2 du chapitre I) il vient :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_C |\psi_1(t,x)|^2 dx = \int_C |\Phi_1(p)|^2 dp$$

Or, considérons une famille de fonctions d'état $\{\Phi_0^\tau\}_{\tau > 0}$ qui tendent, lorsque $\tau \rightarrow \infty$, vers $\delta(p-p_0)$, c'est-à-dire que les fonctions d'onde correspondantes $\psi_0^\tau(t,x)$ tendent vers l'onde plane monochromatique $e^{itp_0^2 - ix \cdot p_0}$, et cherchons la probabilité limite :

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\int_C |\Phi_1^\tau(p)|^2 dp}{\int_V |\psi_0^\tau(t,x)|^2 dx}$$

que nous identifions à la section efficace. Il suffit de faire le calcul pour une famille choisie de Φ_0^τ , par exemple des gaussiennes :

$$\Phi_0^\tau(p) = \left(\frac{\tau}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\tau |p-p_0|^2}. \text{ Posant } p = k\alpha \text{ avec } k > 0 \text{ et } \alpha \in S \text{ (sphère unité) :}$$

$$\begin{aligned}\Phi_1^\tau(k\alpha) &= -2i\pi \int_{\mathbb{R}^3} \delta(k^2 - |q|^2) T(k\alpha, q) \Phi_0^\tau(q) dq \\ &= -i\pi k \int_S T(k\alpha, k\beta) \Phi_0^\tau(k\beta) d\beta\end{aligned}$$

On peut décomposer : $|p-p_0|^2 = (k-k_0)^2 + 4kk_0 \sin^2 \frac{\theta}{2}$, avec $p_0 = k_0 \alpha_0$ et $\cos \theta = \alpha \cdot \alpha_0$, de sorte que

$$\left(\frac{\tau}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\tau|p-p_0|^2} = \left(\frac{\tau}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\tau(k-k_0)^2} \cdot \frac{kk_0\tau}{\pi} e^{-kk_0\tau 4\sin^2 \frac{\theta}{2}} \cdot \frac{1}{kk_0}$$

Lorsque $\tau \rightarrow \infty$, le premier facteur tend vers $\delta(k-k_0)$, le second vers $\delta(\alpha-\alpha_0)$ (mesure de Dirac sphérique) et on peut écrire :

$$\Phi_1^\tau(k\alpha) = -i \frac{\sqrt{\pi\tau}}{k_0} e^{-\tau(k-k_0)^2} \int_S T(k\alpha, k\beta) \frac{kk_0\tau}{\pi} e^{-kk_0\tau 4\sin^2 \frac{\theta}{2}} d\beta$$

de sorte que $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Phi_1^\tau(k\alpha) = -\frac{i\pi}{k_0} \delta(k-k_0) T(k_0\alpha, k_0\alpha_0)$. D'après tout ce qui a été vu plus haut, la section efficace différentielle est alors la limite, pour $\tau \rightarrow \infty$, de

$$\frac{\int_0^\infty k^2 |\Phi_1^\tau(k\alpha)|^2 dk}{\int_V |\Psi_0^\tau(t, x)|^2 dx} = \frac{\int_0^\infty \frac{k^2}{k_0^2} \pi\tau e^{-2\tau(k-k_0)^2} \left| \int_S T(k\alpha, k\beta) \frac{kk_0\tau}{\pi} e^{-kk_0\tau 4\sin^2 \frac{\theta}{2}} dk \right|^2}{\int_V (2\pi)^{-3} e^{-\frac{|x|^2}{2\tau}} dx}$$

Sur cette expression, on voit facilement que le numérateur est équivalent, pour $\tau \rightarrow \infty$, à $2^{-\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{2}} \tau^{\frac{1}{2}} |T(k_0\alpha, k_0\alpha_0)|^2$, et que le dénominateur est équivalent à $(2\pi)^{-5/2} \tau^{\frac{1}{2}}$, d'où la limite

$$\sigma(p_0, \alpha) = 4\pi^4 |T(k_0\alpha, p_0)|^2$$

Dans le cas d'un potentiel d'interaction à symétrie sphérique, $\sigma(p_0, \alpha)$ ne dépend que de l'énergie k_0^2 du flux incident et de l'angle θ entre la direction d'incidence et la direction de diffusion, ce qui était d'ailleurs évident a priori. Enfin, rappelons que l'on avait $A(p, x) = -2\pi^2 T(p, \frac{|p|}{|x|} x)$, ce qui nous permet d'écrire la formule particulièrement simple :

$$\sigma(p_0, \alpha) = |A(p_0, \alpha)|^2$$

qui relie la section efficace différentielle au comportement asymptotique des fonctions propres généralisées $\varphi(p, x)$.

2. La formule de Breit-Wigner (1936). Nous avons vu au chapitre II (formule (8)) que les composantes suivant les polynômes de Legendre des fonctions propres généralisées de l'équation de Schrödinger s'écrivaient :

$$\varphi_{\ell}(k, r) = C_{\ell}^{(1)}(k) h_{V, \ell}^{(1)}(k, r) + C_{\ell}^{(2)}(k) h_{V, \ell}^{(2)}(k, r)$$

et que l'on avait (9) :

$$S_{\ell}(k) = \frac{C_{\ell}^{(1)}(k)}{C_{\ell}^{(2)}(k)}$$

Posons alors $C_{\ell}^{(1)}(k) = c_{\ell} e^{i\delta_{\ell}}$ où $c_{\ell} > 0$ et δ_{ℓ} réel. On appelle la grandeur δ_{ℓ} le déphasage de diffusion. Cette terminologie se justifie aisément : la solution libre correspondant à $\varphi_{\ell}(k, r)$, c'est-à-dire $j_{\ell}(kr)$, se comporte à l'infini comme $\frac{\sin(kr - \frac{\ell\pi}{2})}{kr}$; utilisant alors les comportements asymptotiques de $h_{V, \ell}^{(1)}(k, r)$ et $h_{V, \ell}^{(2)}(k, r)$, on voit que $\varphi_{\ell}(k, r) \sim \frac{\sin(kr - \frac{\ell\pi}{2} - \delta_{\ell})}{kr}$, de sorte que la perturbation se traduit par un déphasage δ_{ℓ} dans les comportements à l'infini. C'est d'ailleurs le même déphasage qui revient dans le comportement asymptotique du noyau de la mesure spectrale (cf. les remarques faites à la fin du chapitre II).

Puisque $C_{\ell}^{(1)}(k) = c_{\ell} e^{i\delta_{\ell}}$, on a $C_{\ell}^{(2)}(k) = c_{\ell} e^{-i\delta_{\ell}}$ (*)

(formule (17) du chapitre II) et par conséquent :

$$S_{\ell}(k) = e^{2i\delta_{\ell}}$$

L'idée de Breit et Wigner [2] était alors la suivante :

* Pour k réel ! en effet $C_{\ell}^{(2)}(k) = \overline{C_{\ell}^{(1)}(k)}$ pour k réel seulement.

puisque $|S_{\ell}(k) - 1|^2 = 4 \sin^2 \delta_{\ell}$ est proportionnel à la $\ell^{\text{ième}}$ composante de la section efficace, on peut relier l'effet (à l'ordre ℓ) de la diffusion à la présence d'un pôle de $S_{\ell}(k)$: on va voir que $|S_{\ell}(k) - 1|^2$ présente un maximum lorsque k (réel) se trouve près d'un pôle (complexe), maximum d'autant plus aigu que le pôle est plus proche de l'axe réel. Un maximum très aigu, cela signifie que dans un domaine d'énergie très étroit, on observe brusquement beaucoup plus de particules diffusées que pour d'autres valeurs de l'énergie même voisines. Le succès de cette interprétation provient du fait que des maxima très aigus sont fréquemment observés dans les courbes expérimentales de section efficace en fonction de l'énergie des particules incidentes. Depuis ce temps-là, on a beaucoup approfondi cette interprétation : nous y viendrons. Voici résumée l'étude mathématique : si $k_0 + i\gamma_0$ est un pôle de $S_{\ell}(k)$, c'est un zéro de $C_{\ell}^{(2)}(k)$, donc

$$C_{\ell}^{(2)}(k) = (k - k_0 - i\gamma_0) A_{\ell}(k)$$

on en déduit :

$$c_{\ell} = |k - k_0 - i\gamma_0| |A_{\ell}(k)|$$

$$\delta_{\ell} = \text{Arg}(k - k_0 + i\gamma_0) - \text{Arg} A_{\ell}(k)$$

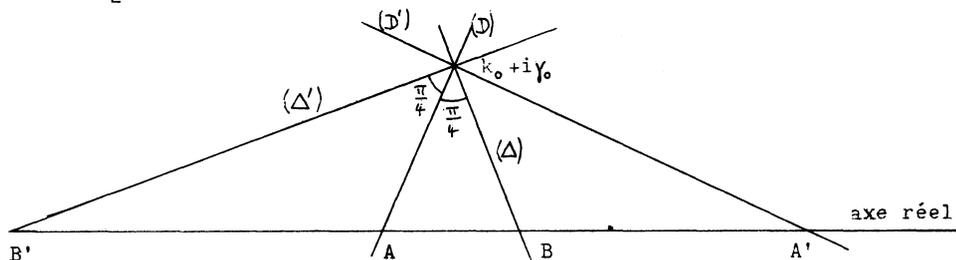
Posons $\alpha = \text{Arg}(k - k_0 + i\gamma_0)$, $\eta = -\text{Arg} A_{\ell}(k)$. Il est alors immédiat que

$$\sin \delta_{\ell} = \sin \alpha \cos \eta + \cos \alpha \sin \eta$$

$$= \frac{\gamma_0}{\sqrt{(k - k_0)^2 + \gamma_0^2}} \cos \eta + \frac{k - k_0}{\sqrt{(k - k_0)^2 + \gamma_0^2}} \sin \eta$$

Cette expression est au maximum en valeur absolue si $k - k_0 = \gamma_0 \tan \eta$ sauf si

$\eta = \pm \frac{\pi}{2}$. Les choses seront plus claires en faisant un dessin :



On a représenté la droite (D) dont la pente est $\operatorname{tg}\eta$, (D') la droite perpendiculaire. Ainsi l'angle formé par la droite (D) et le vecteur $k-k_0 - i\gamma_0$ est $\delta_{\ell} \pm \frac{\pi}{2}$; $|\sin \delta_{\ell}|$ est maximum lorsque k se trouve au point A et $|\sin \delta_{\ell}|$ est supérieur à $\frac{1}{\sqrt{2}}$ lorsque k se trouve compris entre B et B' (zone hachurée). La longueur de BB' mesure donc l'écart de maximum; comme elle est (pour η fixé) proportionnelle à γ_0 , on voit que pour γ_0 très petit, le maximum sera très aigu, surtout si η est voisin de zéro. Lorsque $\eta = 0$ on a $\sin \delta_{\ell} = \frac{\gamma_0}{\sqrt{(k-k_0)^2 + \gamma_0^2}}$ d'où $|S_{\ell}(k)-1|^2 = \frac{4\gamma_0^2}{(k-k_0)^2 + \gamma_0^2}$

(formule de Breit-Wigner); la courbe représentative de la fonction

$k \mapsto \frac{\gamma_0}{(k-k_0)^2 + \gamma_0^2}$ possède un "pic" caractéristique et on l'appelle courbe de Breit-Wigner.

Remarquons pour terminer ce paragraphe que l'analyse de Breit-Wigner

reste purement qualitative; la section efficace (seule accessible expérimentalement)

est égale à $\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) |a_{\ell}(k)|^2$ et par conséquent un maximum de $|a_{\ell_0}(k)|^2$ est noyé par le bruit de fond $\sum_{\ell \neq \ell_0} (2\ell+1) |a_{\ell}(k)|^2$. Si ce maximum est très aigu,

il subsistera un saut brusque de la section efficace, le "bruit de fond"

affectant la hauteur du pic mais non sa largeur. Ainsi, seule la largeur du pic

(et aussi, bien entendu, son énergie) garde une signification quantitative; nous

allons voir au paragraphe suivant comment l'interpréter. En conclusion : un pôle

de l'un des $S_{\ell}(k)$, pourvu que :

a) il soit très voisin des réels (γ_0 petit)

b) η ne soit pas voisin de $\pm \frac{\pi}{2}$

se traduit par un pic dans la courbe de la section efficace en fonction de

l'énergie, dont les deux grandeurs caractéristiques, l'énergie et la largeur,

sont données respectivement par la partie réelle k_0 et la partie imaginaire

γ_0 du pôle. Le fait que pour une certaine valeur de l'énergie du faisceau

incident on ait soudain une diffusion beaucoup plus intense, signifie que la

cible réagit beaucoup plus : c'est pourquoi on dit qu'elle résonne; l'effet

étudié dans ce paragraphe s'appelle une résonance. Nous pouvons donc dire :

les pôles de la matrice S s'interprètent comme des résonances.

3. La signification de la largeur du pic : le retardement. On peut observer et justifier un autre effet lié aux résonances : l'émission de l'onde diffusée est retardée en cas de résonances, d'une durée de l'ordre de 10^{-23} sec . Macrocausalement, cela veut dire que la particule incidente s'attarde autour de la cible. Ainsi, alors que les états stationnaires, ou états liés, associés aux valeurs propres, sont des captures définitives de la particule incidente (celle-ci reste éternellement ⁽¹⁾ au voisinage de la cible) , les résonances correspondent à des captures provisoires. On devrait donc en principe pouvoir relier mathématiquement la grandeur de ce retardement aux fonctions $S_{\ell}(k)$. Dès 1948 (thèse non publiée : voir par exemple [5] , ou [13] , pp. 313-316) EISENBUD et WIGNER ont déduit heuristiquement cette relation ; des démonstrations rigoureuses de cette relation sont beaucoup plus récentes (voir [20] à [22] , mais hors de notre sujet : nous nous proposons ici de montrer que cette relation est simplement un cas très particulier de la relation générale entre les positions des singularités analytiques de $S(p,q)$ et les propriétés macroscopiques des fonctions d'ondes diffusées, dont nous avons déjà parlé au chapitre I . Cette relation repose mathématiquement sur les travaux de IAGOLNIZER (voir [10]) .

Pour cela, nous allons faire comme pour les pôles des $S_{\ell}(k)$ une analyse suivant les composantes sphériques ; soient $\Phi_0(p)$, $\Phi_1(p)$, $\Phi_2(p)$ les états initial, diffusé et final et $\Phi_0^{\ell m}(k)$, $\Phi_1^{\ell m}(k)$, $\Phi_2^{\ell m}(k)$ leurs composantes suivant les harmoniques sphériques $Y_{\ell m}(\alpha)$ (avec toujours $p = k\alpha$) .

Nous avons déjà vu que :

$$\Phi_1^{\ell m}(k) = 2ik a_{\ell}(k) \Phi_0^{\ell m}(k)$$

(1) éternellement ... à l'échelle nucléaire : 10^{-10} sec , c'est l'éternité, l'unité nucléaire étant de l'ordre de 10^{-23} sec .

En décomposant aussi la fonction d'ordre diffusée suivant les harmoniques, il vient : (avec $x = ru$)

$$\psi_1^{\ell m}(t, r) = \frac{(-i)^\ell}{\pi^2} \int_0^\infty ik^3 e^{ik^2 t} j_\ell(kr) a_\ell(k) \Phi_0^{\ell m}(k) dk$$

Faisons alors le changement de variable $E = k^2$ (E est ainsi la variable énergie) . Il vient :

$$\psi_1^{\ell m}(t, r) = C^t e \int_0^\infty E e^{iEt} j_\ell(\sqrt{E}r) a_\ell(\sqrt{E}) \Phi_0^{\ell m}(\sqrt{E}) dE$$

Dans cette formule, on remarquera d'abord que la fonction $j_\ell(\sqrt{E}r)$ est une fonction entière de E . Par ailleurs, pour nous rapprocher de l'analyse faite dans [10] et évoquée au chapitre I de notre exposé, nous supposons que l'on peut écrire $\Phi_0^{\ell m}(\sqrt{E})$ sous la forme $e^{-\gamma\theta|E-E_0|^2} \chi(E)$, où χ est une fonction C^∞ à support compact au voisinage d'une valeur E_0 de l'énergie, et analytique dans un voisinage complexe de E_0 . Dans ces conditions, les propriétés analytiques de la fonction à intégrer dans la formule ci-dessus au voisinage de E_0 (singularités) ne dépendent que de celles de $a_\ell(\sqrt{E})$, pourvu que $E_0 \neq 0$ (on supposera donc que $\chi(0) = 0$) et on peut appliquer le théorème de BROS-IAGOLNITZER [3] que nous avons énoncé au chapitre I, et que nous utilisons ici en une seule variable. Il va de soi, puisque $S_\ell(k) = 1+2ik a_\ell(k)$ que, sauf pour $k = 0$, les pôles de $a_\ell(k)$ sont les mêmes que pour $S_\ell(k)$.

Supposons donc que $a_\ell(\sqrt{E})$ ait une singularité (pôle) en E_0 avec E_0 réel. Dans ce cas, $a_\ell(\sqrt{E})$ est analytique autour de E_0 , en particulier dans un demi-voisinage complexe, ou un tube local dont la base B est en "wedge" (cf. [3]) . Cela implique que le support essentiel de $\psi_1^{\ell m}(t, r)$ est inclus dans le cône S_B de base \hat{B} , ensemble polaire de B . Comme B est en "wedge", \hat{B} est une demi-droite complète : $[0, \infty[$. L'inégalité (I,12) montre alors que $|\psi_1^{\ell m}(t, r)|$ n'a aucune raison de décroître pour $t \rightarrow \infty$.

On interprète cela en disant que la probabilité de présence (relative à une composante d'ordre l, m) dans un domaine borné au demeurant quelconque, ne diminue pas nécessairement.

En revanche, si $a_{\lambda}(\sqrt{E})$ a une singularité en dehors de l'axe réel, en $E_0 + i\Gamma$ avec $\Gamma > 0$, on peut construire un tube local dont cette fois la base B est de la forme $]-\infty, +\delta]$, avec $\delta > 0$ et proportionnel à Γ ; cela implique que \hat{B} est borné et alors l'inégalité (I,12) montre que pour $t \geq 0$

$$|\psi_1^{l,m}(t,r)| \leq C t^e(r) e^{-\delta t}$$

d'où on déduit que la probabilité de présence (relative à la composante d'ordre l, m) dans un domaine borné, décroît exponentiellement avec le temps, d'autant plus vite que Γ est plus petit. Un tel résultat n'est rien d'autre que l'expression, en mécanique ondulatoire, du fait que la particule quitte le domaine au bout d'un temps moyen égal à $1/\delta$ (\hbar/δ lorsqu'on ne suppose pas comme nous l'avons fait que $\hbar = 1$). Nous retrouvons de la sorte, à l'aide du théorème de BROS-IAGOLNITZER, un résultat déjà connu par des voies heuristiques (EISENBUD) ou par des méthodes spectrales (cf. [21], [22] page 270, ou [20]), à savoir qu'en cas de diffusion résonnante, la particule est captée pendant un temps moyen de l'ordre de \hbar/Γ avant de s'échapper à l'infini. De même, en cas de capture sous forme stationnaire, celle-ci est définitive. Ce résultat est également à rapprocher du théorème de MORAWETZ ([12], appendice 3) qui nous dit que pour la diffusion d'ondes lumineuses par un obstacle réfléchissant, l'énergie locale (qui correspond à la probabilité de présence) décroît exponentiellement avec le temps si l'obstacle n'a pas de cavité suffisamment encaissée pour capturer de la lumière.⁽¹⁾

(1) MORAWETZ suppose que l'obstacle est étoilé.

L'analyse faite ici est toutefois plus détaillée que chez MORAWETZ, en ce sens que les estimations sont faites pour chaque composante de ψ_1 ; il ne peut donc y avoir globalement décroissance exponentielle que si les Γ sont uniformément minorés, d'où les hypothèses de MORAWETZ⁽¹⁾. Un autre avantage de la méthode suivie ici est de relier directement les effets de retardement aux pôles de S , ce que ne permettent pas les méthodes de [20] - [22].

4. Le principe d'incertitude de Heisenberg et le principe de macrocausalité : discussion. Tout le monde connaît la formulation classique du principe

d'incertitude : si Δp est l'incertitude sur l'impulsion et Δx l'incertitude sur les coordonnées, on peut au mieux atteindre dans les mesures une précision telle que $\Delta p \cdot \Delta x \approx \hbar$. Une formulation mathématique beaucoup plus précise

peut être donnée, à partir de la remarque suivante : soit $\psi(x)$ la fonction d'onde et $\Phi(p) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \psi(x) dx$ sa transformée de Fourier (fonction d'état) ; on sait que $|\psi(x)|^2$ est la densité de probabilité de trouver la particule au point x , tandis que $|\Phi(p)|^2$ est la densité de probabilité de lui trouver l'impulsion p . Il devient alors naturel de donner

la définition suivante : nous dirons que la particule se trouve au point x_0 avec une incertitude Δx si x_0 est la valeur moyenne de la densité $|\psi(x)|^2$ et Δx sont écart quadratique moyen⁽²⁾, et de même pour l'impulsion. Il est facile d'en déduire les relations d'incertitude, compte tenu que ψ et Φ se correspondent dans la transformation de Fourier (voir [23], tome 1, pages 113-114).

Ce résultat est très général, et indépendant des effets du potentiel auquel est soumis la particule. Au contraire, le principe de macrocausalité s'applique lorsque le potentiel est nul, c'est-à-dire pour des particules libres.

(1) Voir [12], page 155 (Corollary 3.4.)

(2) Cet écart quadratique est vectoriel : nous prenons pour Δp_j ($j = 1, 2, 3$) l'écart quadratique usuel de la densité $p_1 \mapsto \Phi(p_1, p_2^0, p_3^0)$ etc. (p_1^0, p_2^0, p_3^0) étant les composantes de p_0 .

ÉTUDE MACROCAUSALE DE LA DIFFUSION

Or, ce que nous avons montré au chapitre I, c'est que plus l'incertitude sur l'impulsion est petite, plus l'incertitude sur la position sera également petite, à condition d'attendre un temps suffisamment long. Soit donc $\Phi(p)$ une fonction d'état, p_0 et Δp la moyenne et l'écart quadratique moyen de $|\Phi(p)|^2$.

Au chapitre I, nous avons vu que lorsque $\tau \rightarrow \infty$, nous avons à l'instant $t = \tau m$, $\Delta x = \tau \Delta p$ et d'après les relations d'incertitude $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$ d'où $|\Delta p|^2 \cdot \tau \geq \hbar$, ou encore $\tau \geq \frac{\hbar}{|\Delta p|^2}$. Les relations d'incertitude nous fournissent ainsi pour le paramètre τ (et donc pour le temps t) la limite en deçà de laquelle le principe de macrocausalité perd sa validité. On retrouve bien sûr le même résultat par la majoration du reste dans la méthode de la phase stationnaire.

B I B L I O G R A P H I E

- [1] V. de ALFARO, T. REGGE : Potential Scattering
(North Holland 1965)
- [2] G. BREIT, E.P. WIGNER : Physical Review 49 p. 519 (1936)
- [3] J. BROS, D. IAGOLNITZER : Ann. Inst. H. Poincaré 18 p. 147 (1973)
- [4] C. CHANDLER, H.P. STAPP : Journal of Math. Phys. 10, p. 826 (1969)
- [5] E.P. WIGNER : Physical Review 98 p. 145 (1955)
- [6] W. HEISENBERG : Zeitschrift für Physik 120 , p. 513 (1943)
- [7] " " 120 " 673
- [8] " " 123, " 93 (1944)
- [9] D. IAGOLNITZER : Comm. in Math.Phys. 41 " 39 (1975)
- [10] " The S-matrix (North Holland 1978)
- [11] R. JOST : Helvetica Physica Acta 20, p. 256 (1947)
- [12] P.D. LAX, R.S. PHILLIPS : Scattering Theory (Academic Press 1967)
- [13] R.G. NEWTON : Scattering Theory of Waves and Particles
(Mac graw Hill 1966)
- [14] H.M. NUSSENZVEIG : Causality and Dispersion Relations
(Academic Press 1972)
- [15] T. REGGE : Nuovo Cimento 8 p. 671

ÉTUDE MACROCAUSALE DE LA DIFFUSION

- [16] T. REGGE : Nuovo Cimento 9 p. 295
- [17] D. RUELE : Helvetica Physica Acta 35, p. 147 (1962)
- [18] *** Hyperfunctions and Pseudo Differential Equations
Proceedings of a Conference at Katata (1971)
Lecture Notes in Math. n° 287
(Springer-Verlag Berlin)
- [19] J.M. BONY : Séminaire Goulaouic - Schwartz 1976/77
Exposé n° 3
- [20] Ph. A. MARTIN : Comm. in Math. Phys. 47 , p. 221 (1976)
- [21] J.M. JAUCH, K. SINHA,
B. MISRA : Helvetica Physica Acta 45, p. 398 (1972)
- [22] J.M. JAUCH, W.O. AMREIN,
K. SINHA : Scattering Theory in Quantum Mechanics
(Benjamin, 1978)
- [23] A. MESSIAH : Mécanique Quantique (Dunod, Paris)
- [24] T. IKEBE : Eigenfunction expansions associated with the
Schrödinger Operator and their Applications
to Scattering Theory
Archiv for Rational Mechanics and Analysis 5
(1960) pp. 1-34
- [25] L. GARDING : Eigenfunctions Expansions
Lectures at the C.I.M.E. Spectral Analysis
(1973)