Séminaire Équations aux dérivées partielles - École Polytechnique

J. Chazarain

Sur le comportement semi-classique de l'amplitude de diffusion d'un hamiltonien quantique

Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1980-1981), exp. n° 5, p. 1-7

<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1980-1981____A6_0>

© Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)
(École Polytechnique), 1980-1981, tous droits réservés.

L'accès aux archives du séminaire Équations aux dérivées partielles (http://sedp.cedram.org) 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/

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

CENTRE DE MATHÉMATIQUES

91128 PALAISEAU CEDEX - FRANCE

Tél. : (1) 941.82.00 - Poste N°

Télex : ECOLEX 691596 F

S E M I N A I R E G O U L A O U I C - M E Y E R - S C H W A R T Z 1 9 8 0 - 1 9 8 1

SUR LE COMPORTEMENT SEMI-CLASSIQUE DE L'AMPLITUDE DE DIFFUSION D'UN HAMILTONIEN QUANTIQUE

par J. CHAZARAIN

Exposé n° V

18 Novembre 1980

§ 1. INTRODUCTION

Soit $H_h = -h^2 \Delta + V(x)$ un opérateur elliptique dans $\mathbb{R}^n$ (hamiltonien en physique) qui dépend d'un petit paramètre $h \in]0,h_0]$ quantité . On suppose que le potentiel V est C^∞ à support compact. Dans ce cas, H_h est une petite perturbation de l'opérateur $-h^2\Delta$ et on est dans une situation où l'on a une théorie de la diffusion (ou scattering). La quantité importante est l'amplitude de diffusion, notée $A_h(k,\omega,\theta)$; c'est ici une fonction C^∞ des variables $k \in \mathbb{R}^+$, ω et θ dans S_{n-1}.

L'étude semi-classique consiste à essayer d'exprimer le comportement asymptotique, quand $h \to 0$, de A_h en fonction de grandeurs associées à la mécanique classique. Ce problème a été étudié de manière très approfondie en physique quand le potentiel V ne dépend que de la distance $|x|$, voir par exemple les articles de [Ford et Wheeler], [Berry et Mount] , [Connor],... Ici, on se propose de montrer comment la théorie de Maslov permet d'obtenir facilement des résultats sur le comportement semi-classique de A_h quand le potentiel n'est pas supposé de type radial. Plus précisément on montre que la nature du comportement asymptotique de A_h, en tant que fonction de θ , ne dépend que du type de la singularité de la fonction de déviation classique.

§ 2. AMPLITUDE DE DIFFUSION

Pour définir l'amplitude de diffusion, on commence par introduire les fonctions propres généralisées de H_h. Soient $k \in \mathbb{R}^+$ et $\omega \in S_{n-1}$, alors il existe une fonction $\Phi_h(x,k,\omega)$ unique solution de

$$(-h^2\Delta + V(x))\ \Phi_h = k^2\ \Phi_h$$

qui vérifie les conditions suivantes à l'infini en x :

$$\Phi_h - \exp(ih^{-1}k\ x.\omega) = O(|x|^{-\frac{1}{2}(n-1)})$$

$$(\frac{\partial}{\partial r} - ikh^{-1})(\Phi_h - \exp(ih^{-1}k\ x.\omega)) = o(|x|^{-\frac{1}{2}(n-1)}) .$$

On renvoie par exemple à l'article de [Shenk et Thoe] pour la théorie de la diffusion.

Alors, l'amplitude de diffusion est définie par

$$\Phi_h(x,k,\omega) - \exp(ih^{-1}kx.\omega) \underset{\substack{r\to\infty \\ x=r\theta}}{\sim} \frac{e^{ih^{-1}k|x|}}{|x|^{\frac{n-1}{2}}} A_h(k,\omega,\theta) \ .$$

En utilisant la formule de Green et le comportement asymptotique de la solution élémentaire sortante de $(h^2\Delta + k^2)$, on montre de façon classique que A_h s'exprime aussi en fonction de Φ_h par

$$(1) \qquad A_h(k,\omega,\theta) = c_n(kh^{-1})^{\frac{n-2}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} f(r)e^{-ikh^{-1}x.\theta}\left[\left(\frac{\partial}{\partial r} - ikh^{-1}\frac{\theta.x}{x}\right)\right] . \Phi_h dx$$

où $f \in C_o^\infty(]R',R'+1[)$, $\int_{\mathbb{R}} f(r)dr = 1$, et R' est assez grand pour que la boule $|x| < R'$ contienne le support de V (voir [Vainberg]). Cette expression de A_h, montre qu'il suffit de connaître une approximation uniforme de Φ_h sur le compact $R' \leqslant |x| \leqslant R'+1$ pour en déduire une approximation de A_h.

§ 3. DIFFUSION EN MECANIQUE CLASSIQUE

Décrivons maintenant la déviation des trajectoires classiques par le potentiel V. L'hamiltonien classique est donné par $h(x,\xi) = |\xi|^2 + V(x)$ et les trajectoires du champ hamiltonien sont les solutions de l'équation différentielle

$$(2) \qquad \dot{x}(t) = 2\,\xi(t) \ , \quad \dot{\xi}(t) = -dV(x(t)).$$

Notons qu'en dehors du support de V, ces trajectoires sont des droites et que par ailleurs on a l'intégrale première de l'énergie $|\xi(t)|^2 + V(x(t)) = C^{te}$.

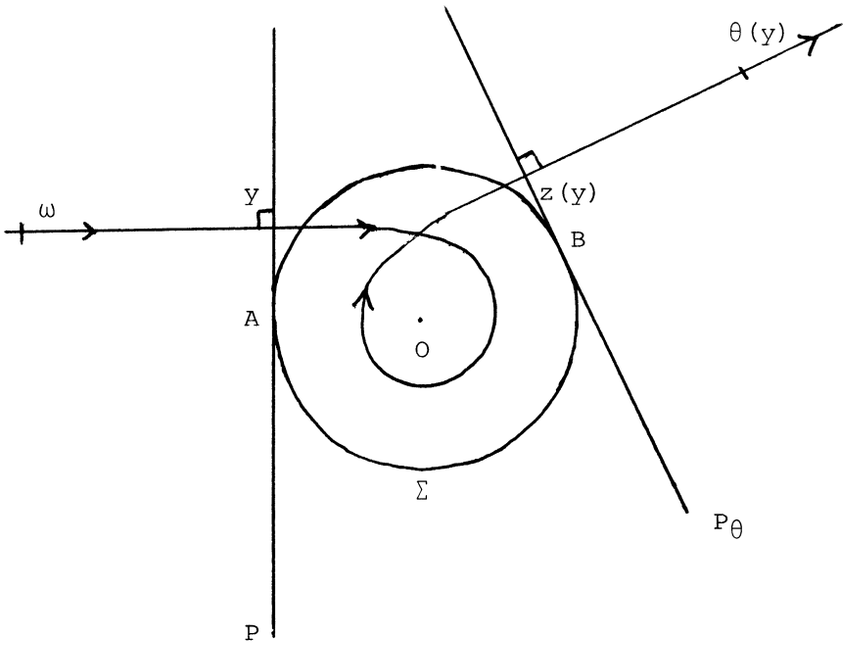
Soit Σ une sphère centrée en O et de rayon R assez grand pour que le support de V soit inclus dans la boule $|x| < R$. On se fixe dorénavant la direction incidente $\omega \in S_{n-1}$ et on appelle P le plan tangent à Σ au point A tel que $\vec{OA} = -R\,\omega$.

A tout point $y \in P$, on associe la solution $x(t,y)$, $\xi(t,y)$ de (2) qui vérifie la condition initiale $x(0,y) = y$ et $\xi(0,y) = k\omega$.

On fait l'hypothèse

(H) | Pour tout $y \in P$ la trajectoire $x(t,y)$ ressort de la boule $|x| \leqslant R$ dès que t est assez grand

On appelle $\theta(y) \in S_{n-1}$ la direction de la trajectoire sortante et on note $z(y)$ le point où cette trajectoire coupe le plan tangent P_θ à Σ au point $\vec{\sigma B} = R\theta(y)$.



On note $T(y)$ le temps auquel la trajectoire passe par le point $z(y)$.

L'application

$$P \ni y \dashrightarrow \theta(y) \in S_{n-1}$$

décrit la deviation de la trajectoire en fonction de la "hauteur" du rayon incident.

Comme $|\theta(y)| = 1$, le rang de cette application différentiable est le même que celui de la matrice carrée $(\partial_y \theta(y), \theta(y))$ dont le déterminant $J(y)$ est appelé section différentielle .

§ 4. COMPORTEMENT SEMI-CLASSIQUE DE L'AMPLITUDE DE DIFFUSION

Compte tenu de la dernière phrase du § 2, on commence par donner une approximation de Φ_h en utilisant un résultat de [Vainberg] où il est démontré que l'on peut approcher Φ_h par la solution Ψ_h du problème de Cauchy asymptotique suivant :

$$(h^2\Delta + V(x) - k^2).\ \Psi_h = O(h^\infty)$$
$$\Psi_h\Big|_P = \exp(ikh^{-1}x.\omega)$$

où l'on impose à Ψ_h d'être une fonction oscillante de Maslov relativement à une variété lagrangienne Λ que l'on décrit ci-dessous. La variété Λ est obtenue en transportant par le flot hamiltonien du symbole $|\xi|^2 + V(x) - k^2$ le graphe, au-dessus de P, de la différentielle de $kx.\omega$. De façon plus explicite, Λ est l'image de l'application j :

$$(3) \qquad \mathbb{R} \times P \ni (t,y) \xrightarrow{\ j\ } (x(t,y),\xi(t,y) \in \Lambda \subset T^*\mathbb{R}^n \ .$$

Il est facile de vérifier que f est une immersion lagrangienne injective et l'hypothèse (H) entraîne que c'est un difféomorphisme sur Λ .

On sait, (cf. [Duistermaat] page 225) qu'il existe une unique, modulo $O(h^\infty)$, solution Ψ_h à ce problème et [Vainberg] démontre que pour tout multi-indice β , on a :

$$\partial_x^\beta(\Psi_h - \Phi_h) = O(h^\infty) \quad \text{uniformément sur tout compact en x.}$$

Par conséquent, en reportant dans (1), il vient

$$(4) \qquad A_h(\theta) = c_n(kh^{-1})^{\frac{n-2}{x}} \int_{\mathbb{R}^n} f(r)e^{-ikh^{-1}x.\omega}\left[\frac{\partial}{\partial r} - ikh^{-1}\,\frac{\theta.x}{x}\right]\Psi_h\ dx + O(h^\infty)$$

où l'on a omis de faire figurer les variables ω et k qui sont fixées pour toute la suite.

Par définition d'une fonction oscillante de Maslov, $\Psi_h(x)$ s'exprime pour x dans le compact $R' \leqslant |x| \leqslant R'+1$ (avec $R' > R$), comme une somme finie d'expressions du type

$$(5) \qquad h^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} e^{ih^{-1}\ \varphi(x,\alpha)}\ a(x,\alpha;h)\,d\alpha$$

où a est une amplitude de degré 0 en h^{-1} à support compact en α et φ est une phase locale pour Λ avec $\alpha \in \mathbb{R}^N$ comme variable de fréquence.

En remplaçant dans (4), on trouve que A_h est égale, modulo $O(h^\infty)$, = une somme d'expressions du type

$$c_n(kh^{-1})^{\frac{n-2}{2}} h^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^N} e^{ih^{-1}[\varphi(x,\alpha)-kx.\theta]} b(x,\alpha;h)dx\, d\alpha$$

où b est une amplitude de degré 1 en h^{-1} à support compact en (x,α) et φ est une phase comme dans (5).

Ainsi A_h, apparant comme une fonction oscillante où $\varphi(x,\alpha) - kx.\theta$ est la fonction de phase dont α et x sont les variables de fréquence. On vérifie facilement que cette phase définit bien une variété lagrangienne Λ_o par l'application

$$\{(\theta;x,\alpha) \Big| \begin{matrix} \varphi'_\alpha = 0 \\ \varphi'_x = k\,\theta \end{matrix} \} \ni (\theta;x,\alpha) \longrightarrow (\theta,-kx) \in \Lambda_o \subset T^*S_{n-1}$$

où -kx est identifié à un vecteur cotangent au moyen du produit scalaire dans $\mathbb{R}^n$.

Notons également, que l'on peut obtenir Λ_o comme résultat de la composition transversale de la variété lagrangienne Λ avec la relation canonique $\mathcal{R} \subset T^*S_{n-1} \times T^*\mathbb{R}^n$ où

$$\mathcal{R} = \{(\theta,-kx;x,k\theta) \mid \theta \in S_{n-1}, x \in \mathbb{R}^n\} \ , \ \Lambda_o = R \circ \Lambda \ .$$

Soit z, le point où la trajectoire qui passe par x à la vitesse $2k\theta$ coupe le plan P_θ, alors -kz et -kx définissent le même vecteur cotangent sur S_{n-1}. Par conséquent, la définition de Λ montre que l'on peut considérer Λ_o comme l'ensemble image de l'application

$$(7) \qquad P \ni y \xrightarrow{j_o} (\theta(y),-kz(y)) \in \Lambda_o \subset T^*S_{n-1}$$

Autrement dit, j_o s'obtient à partir du difféomorphisme j en oubliant le temps et en identifiant les points d'une même trajectoire sortante. De sorte que j_o est également un difféomorphisme et Λ_o s'interprète comme l'ensemble des rayons sortants.

Finalement, on a montré le :

Théorème : Pour k et ω fixés et sous l'hypothèse (H), l'amplitude de diffusion $A_h(\theta)$ est une fonction oscillante de Maslov de degré O relativement à la variété lagrangienne Λ_o.

Remarque : Si l'on s'intéresse aussi à la dépendance de A_h en fonction de la variable k, on peut montrer de façon tout à fait analogue que $A_h(k,\theta)$ est une fonction oscillante de Maslov de degré O relativement à la variété lagrangienne

$$\tilde{\Lambda} = \{(\theta(y),-kz(y);k,2k\,T(y) - 2R) \mid k \in \mathbb{R}^+ , y \in P\}.$$

ce qui permet de donner une démonstration plus naturelle du résultat de la deuxième partie de [Chazarain] .

Ce théorème nous permet d'appliquer la théorie de Maslov pour décrire le comportement asymptotique de $A_h(\theta)$ en fonction de la position de θ par rapport à la caustique de Λ_o. Plus précisément, on sait (cf.[Duistermaat] , [Guillemin et Sternberg]) que ce comportement dépend de la nature de la singularité de la projection lagrangienne π: $\Lambda_o \ni (\theta,-kx) \to \theta \in S_{n-1}$.

Le difféomorphisme j_o nous montre que cette projection π a le même type de singularité que la fonction de déviation :

$$P \ni y \longrightarrow \theta(y) \in S_{n-1}.$$

L'ensemble de ses points critiques est égal à $\{y \in P \mid J(y) = 0\}$ et l'image de cet ensemble par j_o est l'ensemble critique $\Sigma \subset \Lambda_o$ de π. La caustique C est par définition l'ensemble des valeurs critiques $\pi(\Sigma)$. D'où la discussion suivante :

a) Si $\theta_o \notin \pi(\Lambda_o)$. On dit que θ_o est dans la zone d'ombre. Alors, on a

$$A_h(\theta_o) = O(h^\infty)$$

b) Si $\theta_o \in \pi(\Lambda_o)$ mais $\theta_o \notin C$. Alors, $\pi^{-1}(\theta_o)$ est constitué d'un nombre fini de points $\lambda_1^o,\ldots\lambda_p^o \in \Lambda_o$ qui sont images de points $y_1^o,\ldots,y_p^o$ de P et il existe des voisinages V_ℓ des points λ_ℓ^o et un voisinage W de θ_o tels que les restrictions $\pi_\ell = \pi|_{V_\ell}$ soient des difféomorphismes sur W. Alors, il vient pour l'amplitude de diffusion

$$A_h(\theta) \underset{h \to o}{\sim} \sum_{\ell=1}^{p} c_\ell(\theta) e^{ih^{-1}\varphi_\ell(\theta)} \quad , \quad \theta \in W$$

où $\varphi_\ell(\theta)$ est une phase locale de $\Lambda|_{V_\ell}$.

De plus les coefficients $c_\ell(\theta)$ peuvent être calculés en appliquant le théorème de la phase stationnaire à (6), on trouve (cf. [Vainberg])
$c_\ell(\theta) = |J(y_\ell(\theta))|^{-1/2}$ avec $y_\ell(\theta) = j_o^{-1} \circ \pi_\ell^{-1}(\theta)$.

c) Si $\theta_o \in C$. Il faut distinguer selon le type de la singularité de π au dessus de θ_o. Supposons que $\pi^{-1}(\theta_o) = \lambda_o$ et que l'on a une singularité de type pli en λ_o, ce qui est le cas le plus usuel (cas appelé "rainbow scattering" dans la littérature physique). De façon précise, cela signifie que l'espace vectoriel $\mathrm{Ker}(T_{\lambda_o}\pi)$ est transverse à l'espace tangent en λ_o à Σ. Alors, dans ce cas A_h admet le comportement suivant au voisinage de θ_o :

$$A_h(\theta) \sim h^{-1/6} b_o e^{ih^{-1}f(\theta)} A(h^{-2/3}\rho(\theta)) + h^{1/6} c_o e^{ih^{-1}f(\theta)} A'(h^{-2/3}\rho(\theta))$$

où $\rho(\theta) = 0$ est une équation de la caustique C au voisinage de θ_o telle que $\rho < 0$ correspond à la zone d'ombre. La fonction de Airy A(s) est définie par

$$A(s) = \int_{\mathbb{R}} \exp i(su - \tfrac{1}{3}u^3)\,du .$$

Il serait intéressant d'expliciter les constantes b_o et c_o en fonction de grandeurs classiques.

REFERENCES

M. V. Berry, K. E. Mount : Rep. prog. Phys. 35 (1972) p.315-397.

J. Chazarain : Proc. Nato Symp. Maratea ed. by H. G. Garnir (à paraître).

J. N. L. Connor : Proc. Nato Symp. Cambridge, ed. by M. S. Child, Reidel Publ. (1980)

J. J. Duistermaat : Comm. Pure Appl. Math. 27 (1974), 207-281.

K. W. Ford, J. A. Wheeler : Ann. Phys. 7 (1959), 239-258.

V. Guillemin, S. Sternberg : Geometric asymptotics, A.M.S. (1977).

N. Shenk, O. Thoe : Rocky Mount. J. of Math. 1 (1971), 89-125.

B. R. Vainberg : Funct. Anal. and Appl. 11 (1977), 247-257.

*
* *