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>

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 quantité en physique) qui dépend d'un petit paramètre $h \in]0,h_0]$. 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 :

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

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

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

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

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

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

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 $|\xi(t)|^2 + V(x(t)) = C^{te}$.

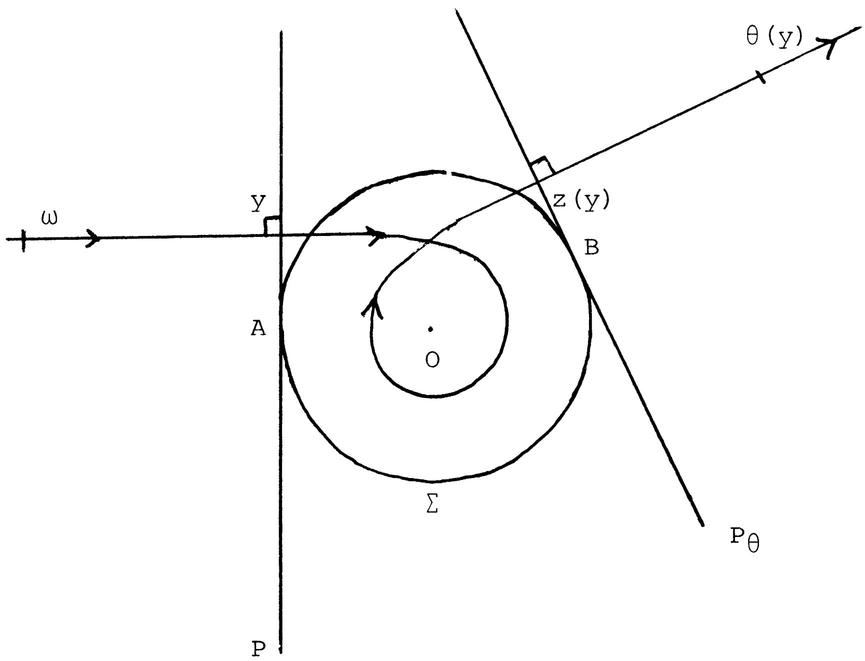
Soit Σ une sphère centrée en O et de rayon R assez grand pour que le support de V soit inclus dans la boule $|x| < R$. On se fixe dorénavant la direction incidente $\omega \in S_{n-1}$ et on appelle P le plan tangent à Σ au point A tel que $\vec{\sigma A} = -R\,\omega$.

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

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

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 :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 :

<u>Théorème</u> : 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.

<u>Remarque</u> : 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 $\{y \in P | J(y) = 0\}$ 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) <u>Si</u> $\theta_o \notin \pi(\Lambda_o)$. On dit que θ_o est dans la zone d'ombre. Alors, on a

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

b) <u>Si</u> $\theta_o \in \pi(\Lambda_o)$ <u>mais</u> $\theta_o \notin C$. 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

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

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.

*
* *