JOURNÉES ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

BERNARD PARISSE

Liens entre les résonances pour l'opérateur de Dirac et de Schrödinger

Journées Équations aux dérivées partielles (1990), p. 1-7

<http://www.numdam.org/item?id=JEDP_1990____A12_0>

LIENS ENTRE LES RESONANCES POUR L'OPERATEUR DE DIRAC ET DE SCHRODINGER

Bernard PARISSE

E.N.S., 45 rue d'Ulm, 75005 PARIS &
Département de Mathématiques, Bat. 425,
Université Paris XI, 91405 ORSAY

L'opérateur de Schrödinger modélise des particules non relativistes alors que l'opérateur de Dirac modélise des particules relativistes de spin $\frac{1}{2}$. On va voir le lien formel dans la définition semi-classique des résonances de ces deux opérateurs, puis on introduira la vitesse de la lumière dans l'équation de Dirac pour chercher des limites non relativistes de quantités liées aux résonances et les comparer avec les résultats obtenus avec l'opérateur de Schrödinger.

1.Définition semi-classique.

On considère l'opérateur de Schrödinger $P=-h^2\Delta+V(x)$ défini sur $C_0^\infty(\mathbb{R}^3,\mathbb{C})$ et l'opérateur de Dirac $D=h\,\Sigma_{i=1}^3\alpha_i D_i+\alpha_4+V(x)\,I_4$ défini sur $C_0^\infty(\mathbb{R}^3;\mathbb{C}^4)$ avec :

$$\alpha_i=\begin{pmatrix}0 & \sigma_i\\ \sigma_i & 0\end{pmatrix} \quad \text{pour } i=1,2,3\ , \qquad \alpha_4=\begin{pmatrix}I_2 & 0\\ 0 & -I_2\end{pmatrix},$$

I_n est l'identité de $\mathbb{C}^n$ et les σ_i sont les matrices de Pauli définies par :

$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$, $\sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$, $\sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$.

On a la relation algébrique $\alpha_i\alpha_j+\alpha_j\alpha_i=2\delta_{i,j}$.

On veut définir les résonances pour ces opérateurs lorsque h tend vers 0 avec les hypothèses suivantes sur le potentiel :

- $V(x)$ est borné (on peut faire une hypothèse moins restrictive du type $|V(x)|\leqslant r(x)$ où $r\in C^\infty(\mathbb{R}^3,\mathbb{R})$ est telle qu'il existe $R\in C^\infty(\mathbb{R}^3,[1,\infty[)$ qui mesure le gain losqu'on dérive par rapport à x et vérifie : $Rr\geqslant 1$ et $\forall\alpha\in\mathbb{N}^3, \exists C_\alpha\ /\ |\partial_x^\alpha r|\leqslant C_\alpha r\,R^{-|\alpha|}$ et $|\partial_x^\alpha r|\leqslant C_\alpha R\,R^{-|\alpha|}$)

-V admet une extension holomorphe dans le domaine complexe

$\{x \in \mathbb{C} / |\mathrm{Re}(x)| \geqslant C$ et $|\mathrm{Im}\ x| \leqslant \langle \mathrm{Re}\ x \rangle / C\}$ où $\langle x \rangle = \sqrt{1+x^2}$.

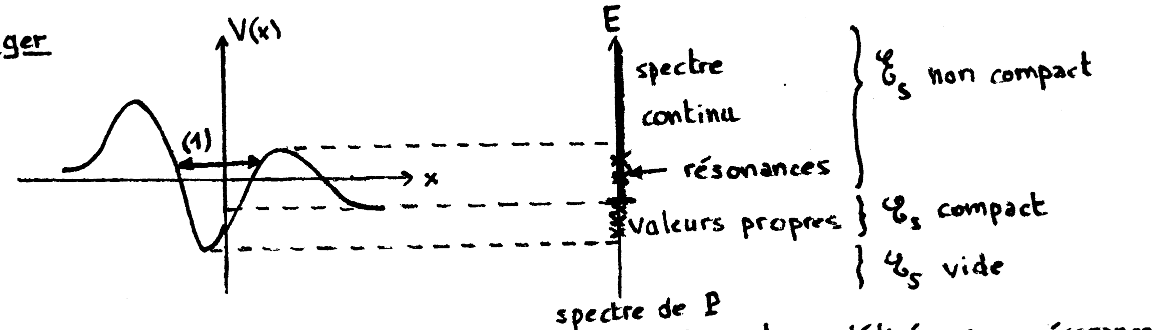
La mécanique classique correspondante est déterminée dans le cas non relativiste par le hamiltonien $p(x,\xi)=\xi^2+V(x)$, qui est le symbole de l'opérateur de Schrödinger.

Dans le cas relativiste le hamiltonien est $p^+(x,\xi)=V(x)+\langle\xi\rangle$. La matrice 4x4 symbole de l'opérateur de Dirac est $D_V(x,\xi)=\Sigma_{i=1}^{3}\alpha_i\xi_i+\alpha_4+V(x)I_4$. Les valeurs propres de cette matrice sont $p^{\pm}(x,\xi)=V(x) \pm \langle\xi\rangle$ chacune de multiplicité deux.

Le type de spectre près d'un niveau d'énergie E pour Schrödinger est déterminé par l'ensemble $\mathcal{E}_S=\{(x,\xi)/\ p(x,\xi)-E$ est non inversible$\}=$ $=\{(x,\xi)/p(x,\xi)=E\}$. Pour Dirac, il faut considérer $\mathcal{E}_D=\{(x,\xi)/\ D_V(x,\xi)-E$ est une matrice non inversible$\}$. Bien sûr $\mathcal{E}_D=\{(x,\xi)/\ p^+(x,\xi)=E$ ou $p^-(x,\xi)=E\}$.

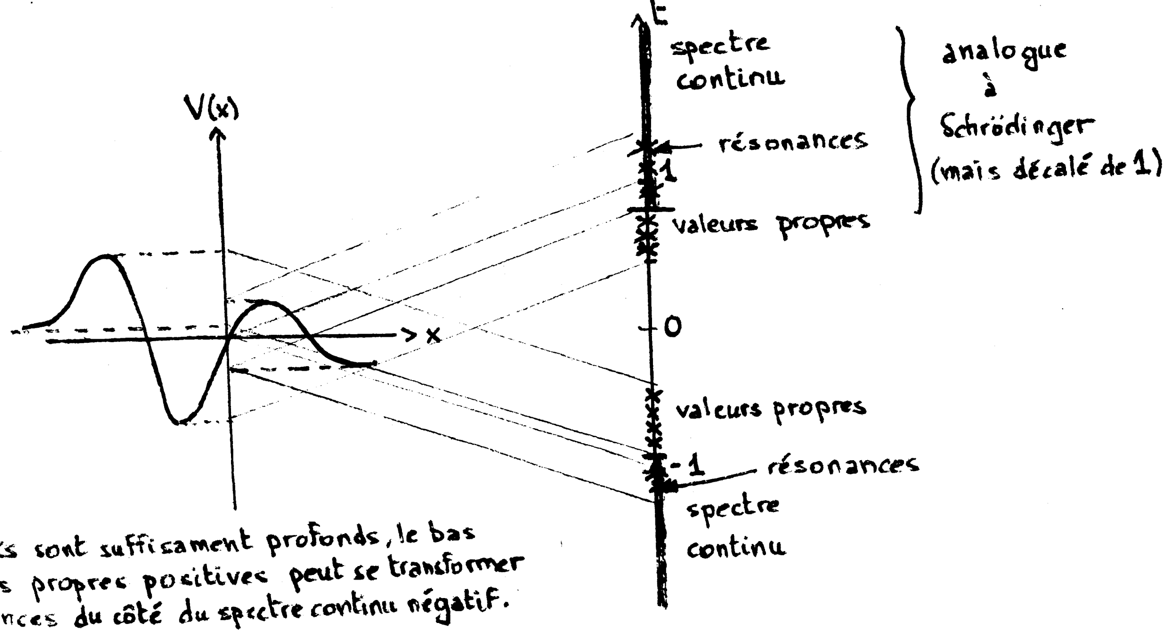
<u>Par exemple</u>, on peut obtenir les schémas suivants :

* <u>Schrödinger</u>



(1) état localisé à l'instant t fuyant à l'infini par effet tunnel, modélisé par une résonance

* <u>Dirac</u>



Si les puits sont suffisament profonds, le bas des valeurs propres positives peut se transformer en résonances du côté du spectre continu négatif.

On va maintenant définir les résonances comme des valeurs propres de P ou D sur des espaces de Hilbert.

On définit d'abord des <u>classes de symbole</u> par :

$S^{m,n} = \{a \in C^{\infty}(\mathbb{R}^6, \mathbb{R}) /$ pour tout $(\alpha,\beta) \in \mathbb{N}^2$ il existe $C_{\alpha,\beta}$ tel que

(1.0) $\qquad |\partial_x^{\alpha}\partial_{\xi}^{\beta} a(x,\xi)| \leqslant C_{\alpha,\beta}\langle\xi\rangle^{m-|\beta|}\langle x\rangle^{n-|\alpha|} \qquad \}$ et

$\tilde{S}^{m,n} = \{a \in C^{\infty}(\mathbb{R}^6, \mathbb{R}) /$ pour tout $(\alpha,\beta) \in \mathbb{N}^2 - \{(0,0)\}$ on a (1.0) $\}$.

On dit que $G \in \tilde{S}^{1,1}$ est une <u>fonction fuite</u> pour :

- Schrödinger si en dehors d'un compact de $p^{-1}(E)$ on a

$(1.1)_S \qquad H_p(G) = \{p, G\}$ est positif et elliptique sur $p^{-1}(E)$.

- Dirac si

i) $(1.1)_{D+} \qquad \{p^+, G\}$ est positif et elliptique sur $(p^+)^{-1}(E)$ en dehors d'un compact de $(p^+)^{-1}(E)$.

ii) $(1.1)_{D-} \qquad \{p^-, G\}$ est positif et elliptique sur $(p^-)^{-1}(E)$ en dehors d'un compact de $(p^-)^{-1}(E)$.

Par exemple $G(x,\xi) = x.\xi$ est dans $\tilde{S}^{1,1}$ et est une fonction fuite pour certains potentiels (par exemple pour V constant en dehors d'un compact).

On associe à G une <u>variété I-lagrangienne</u> Λ_{tG} définie par :

$(x,\xi) \in \Lambda_{tG}$ si $\mathrm{Im}\,\xi = -t\,\partial_{\mathrm{Re}\,x} G(\mathrm{Re}\,x, \mathrm{Re}\,\xi)$ et $\mathrm{Im}\,x = t\,\partial_{\mathrm{Re}\,\xi} G(\mathrm{Re}\,x, \mathrm{Re}\,\xi)$.

Les symboles p, p^+, p^- sont bien définis sur Λ_{tG}. Lorsqu'on fait des hypothèses plus générales sur le potentiel $V(x)$, il faut s'assurer dans le cas de Dirac que p^+ et p^- sont bien définis sur Λ_{tG}, c'est-à-dire que pour t assez petit, Λ_{tG} est loin de $\xi^2 = -1$.

Pour $t > 0$ assez petit on aura pour $q = p, p^+, p^-$ et $(x,\xi) \in \Lambda_{tG}$:

(1.2) $\qquad q(x,\xi) = q(\mathrm{Re}\,x, \mathrm{Re}\,\xi) - it\{q,G\}(\mathrm{Re}\,x, \mathrm{Re}\,\xi)$.

<u>Donc $p-E$ [resp. $p^{\pm}-E$] sera inversible à l'infini sur Λ_{tG}</u> grâce à l'hypothèse d'ellipticité (1.1).

Il reste à définir des espaces de Hilbert et un calcul symbolique pour lequel P et D sont des o.p.d. de symbole p et D_V vivant sur Λ_{tG}.

On utilise une transformation de F.B.I.

Pour $u \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^3;\mathbb{C})$, on définit la transformée de F.B.I. de u par :

$$(1.3)\quad \forall\alpha=(\alpha_x,\alpha_\xi)\in\mathbb{C}^6,\ (Tu)(\alpha)=\int_{x\in\mathbb{R}^3} e^{i\frac{\phi(x,\alpha)}{h}}\, t(x,\alpha,h)\, \chi\left(\frac{x-Re(\alpha_x)}{\langle\alpha_x\rangle}\right) u(x)dx.$$

où : la phase ϕ vaut $\phi(x,\alpha)=(\alpha_x-x)\alpha_\xi+i\frac{\langle\alpha_\xi\rangle}{\langle\alpha_x\rangle}(x-\alpha_x)^2$,

$\chi\in C_0^\infty(|x|\leqslant\frac{1}{C})$ est une troncature valant 1 pour $|x|\leqslant\frac{1}{2C}$,

$t(x,\alpha,h)$ est un vecteur de $\mathbb{C}^4$, dépendant de $Re\alpha$, de symbole dans $h^{-9/4}\,S^{3/4,-3/4}$ dans le domaine où $\chi_1\neq 0$, affine en x et tel que $\det(t,\partial_{x_1}t,\partial_{x_2}t,\partial_{x_3}t)$ soit elliptique à valeurs réelles. Par exemple :

$$t(x,\alpha,h)=h^{-9/4}\langle\alpha_\xi\rangle^{3/4}\langle\alpha_x\rangle^{-3/4}\left(1,\frac{x_1}{\langle\alpha_x\rangle},\frac{x_2}{\langle\alpha_x\rangle},\frac{x_3}{\langle\alpha_x\rangle}\right).$$

On définit alors $H(\Lambda_{tG};\mathbb{C})=\{u\in L^2(\mathbb{R}^3_x)/\ Tu\, e^{-2t\tilde{G}(t,x,\xi)/h}\in L^2(\mathbb{R}^6_{x,\xi},\mathbb{C}^4)\}$ et $H(\Lambda_{tG};\mathbb{C}^4)=\{u=(u_1,u_2,u_3,u_4)/\ u_i\in H(\Lambda_{tG};\mathbb{C})\}$. Ici $\tilde{G}$ est une fonction proche de G définie par $\tilde{G}(x,\xi)=G(Re\, x, Re\,\xi)-(Re\,\xi)\partial_{Re\,\xi}G(Re\, x, Re\,\xi)$.

Lorsqu'on suit une trajectoire de H_p (respectivement H_{p^+} ou H_{p^-} dans le cas de Dirac), la fonction fuite G tend vers $\pm\infty$ si le paramètre t tend vers $\pm\infty$, u doit alors être à décroissance exponentielle si t tend vers $+\infty$ et peut avoir une croissance exponentielle si t tend vers $-\infty$.

On peut aussi définir des espaces de Sobolev du même type en rajoutant un poids $m(x,\xi)$ appartenant à une classe de symbole $S^{p,q}$. Par exemple $H(\Lambda_{tG},\langle\xi\rangle^n,\mathbb{C})=\{u\in L^2(\mathbb{R}^3_x)/\ \langle\xi\rangle^n\, Tu\, e^{-2t\tilde{G}(t,x,\xi)/h}\in L^2(\mathbb{R}^6_{x,\xi},\mathbb{C})\}$ si $m=\langle\xi\rangle^n$.

Si G ne dépend que de x, on retrouve les espaces de Sobolev habituels mais pour la mesure $e^{-G(x)}dx$.

On peut alors définir des <u>opérateurs pseudo-différentiels</u> sur ces espaces : le symbole principal d'un tel opérateur est alors un scalaire dans le cas de Schrödinger et une matrice 4x4 dans le cas de Dirac. On a alors la loi habituelle de composition pour les symboles principaux.

L'opérateur différentiel P-E [respectivement D(h)-E] peut être vu comme un OPD de symbole $p(x,\xi)-E$ [resp. $D_V(x,\xi)-E$] opérant de $H(\Lambda_{tG},\mathbb{C})$ dans $H(\Lambda_{tG},\mathbb{C})$ [resp. $\mathbb{C}^4$] de domaine un espace à poids $H(\Lambda_{tG},\langle\xi\rangle^2,\mathbb{C})$ [resp. $H(\Lambda_{tG},\langle\xi\rangle,\mathbb{C}^4)$] .

Comme ces symboles sont inversibles à l'infini sur Λ_{tG}, on a :

<u>Théorème 1 :</u> Il existe t_0 et h_0 tels que pour $0<h\leqslant h_0$ et $0<t\leqslant t_0$, le spectre de P-E [resp. D(h)-E] dans $H(\Lambda_{tG},1)$ est discret au voisinage de E et forme les résonances. A chaque résonance correspond un espace spectral.

On peut montrer que ces résonances sont indépendantes de t petit et de G lorsque h tend vers zéro (cf [H-S1] pour le cas de Schrödinger).

<u>Théorème 2 :</u>

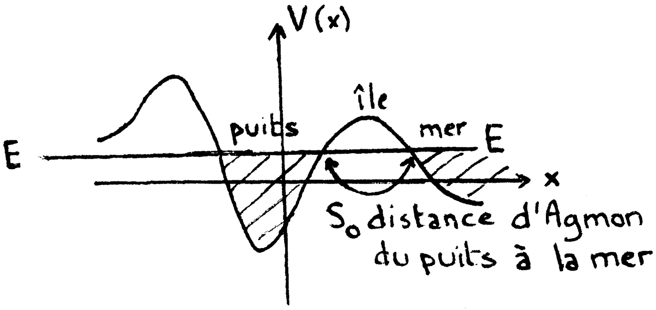
Les résonances de l'opérateur de Dirac sont de multiplicité paire.

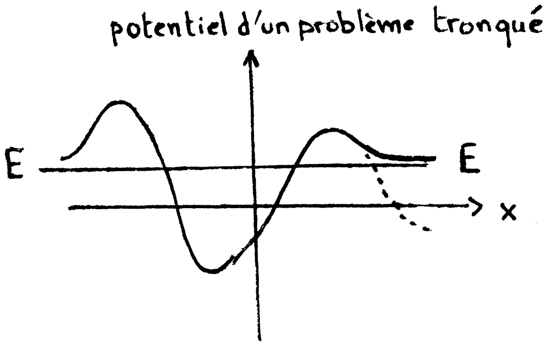
<u>Exemple :</u>

Reprenons le cas du "puits dans une île" du début de cette section.

On peut montrer qu'à chaque valeur propre du "problème tronqué au voisinage de la mer" correspond une résonance exponentiellement proche.

Plus précisément l'écart entre la valeur propre est inférieure à $e^{(\varepsilon-2S_0)/h}$, où S_0 est la distance d'Agmon du puits à la mer. Ici la métrique d'Agmon est $(V-E)_+\ dx^2$ dans le cas de Schrödinger et $(1-(V-E)^2)_+dx^2$ dans le cas de Dirac.





Lorsque le puits se réduit à un point et est non dégénéré, on peut donner une expression explicite de la partie imaginaire de la résonance associée à la première valeur propre.

2. Limite non relativiste de Dirac pour un cas particulier.

On introduit ici un nouveau paramètre pour l'équation de Dirac : c la célérité de la lumière qui tend vers $+\infty$ en limite non relativiste. On veut voir si des résultats de Dirac tendent vers ceux de Schrödinger lorsque c tend vers l'infini, comme la relativité restreinte tend vers la mécanique newtonnienne en mécanique classique.

Les opérateurs de Schrödinger et Dirac avec constantes physiques s'écrivent respectivement :

$P=-(\hbar^2/2m)\,\Delta\ +W(x)$ et

$D(h)=-\hbar c\,\Sigma_{i=1}^{3}\alpha_i D_i + mc^2\,\alpha_4 + W(x)I_4$ avec $\hbar$=constante de Planck, m=masse de la particule, c=vitesse de la lumière, W(x) potentiel.

On les renormalise sous la forme de la section 1 en posant pour Schrödinger $h=h_S=\hbar/\sqrt{2m}$ et $V(x)=W(x)$, pour Dirac il faut diviser globalement l'opérateur par mc^2 (ce qui signifie qu'il faudra multiplier valeurs propres, résonances, ... par mc^2 avant comparaison avec Schrödinger) et poser $h=h_D=\ \hbar/(mc)$ et $V(x)=W(x)/(mc^2)$.

Remarquons que $mc^2\,p^+(x,\xi)\ = mc^2\,(V/mc^2 + \sqrt{1+\xi^2/mc^2}\,)$

$= mc^2\ +V(x)+\xi^2/(2m) + O(1/c^2)$,

on retrouve à une constante près (mc^2, l'énergie de masse de la particule) le symbole $p(x,\xi)$.

Soit $S_{0,D}$ [respectivement $S_{0,S}$] la distance d'Agmon d'un point à un autre pour Dirac au niveau d'énergie 1 [resp. Schrödinger au niveau 0, niveau d'énergie correspondant], alors : $\mathbf{lim}_{c\to\infty}\ (S_{0,D}/h_D) = S_{0,S}/h_S$.

En effet, la métrique d'Agmon pour l'opérateur de Dirac est :

$(1-(W-1)^2)_+dx^2=(1-(\ V(x)/mc^2-1)^2)_+dx^2=(2V(x)/mc^2-(V(x)/mc^2)^2)_+dx^2$

En prenant la racine carrée du terme principal $2V(x)_+/mc^2$ et en divisant par $h_D=\hbar/mc$ on obtient :

$(mc/\hbar)\ (2V_+/mc^2)^{1/2} = (2m)^{1/2}/\hbar\ \ (V_+)^{1/2} = (V_+)^{1/2}\ /\ h_S$.

Ce que l'on désirait puisque la métrique d'Agmon pour Schrödinger est V_+dx^2.

On peut ensuite comparer la partie imaginaire des résonances. On a alors un résultat pour la résonance associée à la première valeur propre dans le cas du puits ponctuel non dégénéré dans une île avec potentiel radial :

$$\lim_{c\to\infty} \mathrm{equ}_{\hbar\to 0}\ (mc^2\ \mathrm{Im}\ z_D\ /\mathrm{Im}\ z_S) = 1\ ,$$

où equ désigne un équivalent lorsque $\hbar$ tend vers 0 et z_D [resp z_S] est la résonance pour Dirac de multiplicité deux (dégénérescence due au spin) [resp. Schrödinger de multiplicité 1].

Problème : il serait intéressant d'obtenir des résultats de ce type sans avoir à tenir compte de l'ordre des limites et/ou pour d'autres résonances. La théorie semi-classique à un paramètre est insuffisante pour résoudre de tels problèmes. Il faudrait une théorie à deux paramètres.

BIBLIOGRAPHIE

[A-C] : J. Aguilar et J.M. Combes :
A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger Hamiltonians
Comm. Math. Phys. 22 (1971), 280-294

[B-H] : E. Balslev and B.Helffer
Limiting absorption principle and resonances for the Dirac operator

[H-M] : B. Helffer et A.Martinez :
Comparaison entre les diverses notions de résonances.
Préprint Université Paris-Sud (n° 877)

[H-S1] : B. Helffer et J. Sjöstrand :
Résonances en limite semi-classique
Mémoires n° 24/25 de la SMF (1986), Tome 114, Fasc.3

[P] : B.Parisse
Résonances paires pour l'opérateur de Dirac
note aux C.R.A.S., t.310, série I, p.265-268 (1990) & en préparation

[S] : P. Seba :
The complex scaling method for Dirac resonances
Preprint BIBOS 1987 et à paraître in Lett. Math. Phys.

[W] : X.P.Wang :
Puits multiples pour l'opérateur de Dirac
Annales de l'IHP volume 43, n°3, 1985, p. 269-319