J. Ginibre

Théorie de la diffusion pour l'équation de Schrödinger

Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1980-1981), exp. n° 4, p. 1-19

<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1980-1981____A5_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

THEORIE DE LA DIFFUSION POUR L'EQUATION DE SCHRÖDINGER

par J. GINIBRE

Exposé n° IV

18 Novembre 1980

On se propose dans cet exposé :

1) de présenter brièvement les principes généraux de la théorie de la diffusion.

2) de préciser comment les problèmes se posent dans le cas de l'équation de Schrödinger, et de décrire quelques réponses classiques aux questions les plus simples,

3) de décrire les grandes lignes d'une méthode développée au cours des trois dernières années pour répondre aux questions plus difficiles concernant la structure qualitative du spectre et le problème de la complétude asymptotique.

§ 1. GENERALITES SUR LA DIFFUSION

On considère un système dont on sait décrire l'évolution au cours du temps, c'est-à-dire en pratique un espace vectoriel X où opère un groupe à un paramètre de transformations $U(t)$, $t \in \mathbb{R}$ (pas nécessairement linéaire). Souvent, cette évolution est décrite par un système d'équations aux dérivées partielles pour lesquelles on sait résoudre le problème de Cauchy globalement, et X est l'espace des données de Cauchy. Donnons quelques exemples.

Exemple 1 : En Mécanique Classique, un système à n degrés de libertés est décrit dans l'espace de phase $X = \mathbb{R}^{2n}$ dont un point générique (q,p) est formé des n coordonnées de position q et des n coordonnées d'impulsion p, et l'évolution est décrite par les équations de Hamilton

$$\dot{q} = p \quad , \quad \dot{p} = - \frac{\partial V}{\partial q} ,$$

où le potentiel V est une application convenable de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$.

Exemple 2 : En Mécanique Quantique, X est l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$ et l'évolution est décrite par l'équation de Schrödinger

$$i\dot{\psi} = H \psi ,$$

où H est par exemple l'opérateur $H = -\Delta + V$, Δ est le Laplacien dans $\mathbb{R}^n$, et V est l'opérateur de multiplication par une fonction de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$ (qu'on notera également V).

Exemple 3 : On peut s'intéresser à la théorie d'un champ scalaire relativiste $u : \mathbb{R}^4 \ni (t,\vec{x}) \rightarrow u(t,\vec{x}) \in \mathbb{R}$ dont l'évolution est décrite par l'équation de Klein Gordon non linéaire :

$$\ddot{u} - \Delta u + m^2 u + u^3 = 0 .$$

Les données de Cauchy sont formées du couple $(u(0,\vec{x}), \dot{u}(0,\vec{x}))$ qu'on peut prendre dans l'espace $X = H^1(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3)$.

On notera en général φ l'élément générique de X. S'étant procuré le groupe d'évolution totale $U(t)$, on se pose ensuite la question de déterminer le comportement asymptotique des solutions $\varphi(t) = U(t)\,\varphi(0)$ de l'équation d'évolution quand t tend vers l'infini. Ce problème est en général très difficile, mais dans certains cas, et c'est à ceux là que la théorie de la diffusion va s'appliquer, on dispose de l'information supplémentaire suivante : il existe dans X un second groupe d'évolution $U_0(t)$, $t \in \mathbb{R}$, plus simple que $U(t)$ et supposé parfaitement connu, qu'on appellera par la suite évolution libre, et on espère, au moins pour une certaine classe de données de Cauchy, que l'évolution totale ressemble à l'évolution libre quand t tend vers l'infini. Plus précisément pour une donnée initiale $\varphi(0) = \varphi_0 \in X$, on espère qu'il existe $\varphi_+ \in X$ et $\varphi_- \in X$ tels que (voir figure 1)

$$U(t)\varphi_0 - U_0(t)\varphi_\pm \rightarrow 0 \text{ quand } t \rightarrow \pm\infty \qquad (1.1)$$

Dans les exemples précédents, on pourra essayer les évolutions libres décrites par les équations suivantes :

Exemple 1 : équations de Hamilton sans potentiel :

$$\dot{q} = p \quad , \quad \dot{p} = 0.$$

Exemple 2 : équation de Schrödinger sans potentiel :

$$i\dot{\psi} = -\Delta\psi$$

Exemple 3 : équation de Klein-Gordon linéaire :

$$\ddot{u} - \Delta u + m^2 u = 0 .$$

Dans ces trois exemples, l'évolution libre est linéaire.

En général aucun des deux termes du premier membre de (1.1) n'a de limite quand $t \to \pm\infty$. Il est commode de faire apparaître des quantités ayant des limites en appliquant à (1.1) soit $U(-t)$, soit $U_o(-t)$. Le problème se décompose alors en deux.

1) Existence des limites

$$\lim_{t \to \pm\infty} U(-t)U_o(t)\varphi_\pm \quad , \tag{1.2}$$

autrement dit, étant donné un mouvement libre défini par la donnée initiale φ_+ (resp. φ_-), existe-t-il un mouvement total qui lui est asymptotique quand $t \to +\infty$ (resp. $t \to -\infty$).

2) Existence des limites

$$\lim_{t \to \pm\infty} U_o(-t)U(t)\varphi_o \quad , \tag{1.3}$$

autrement dit, étant donné un mouvement défini par la donnée initiale φ_o, existe-t-il des mouvements libres qui lui sont asymptotiques quand $t \to \pm\infty$.

Le problème le plus intéressant est évidemment le second car une réponse affirmative répond en un certain sens à la question initiale. C'est aussi le plus difficle, et on commence donc par le premier. On essaie pour cela de définir deux applications $\Omega_\pm$ de X dans X par :

$$\Omega_\pm = \lim_{t \to \pm\infty} U(-t)U_o(t) \tag{1.4}$$

Les $\Omega_\pm$, s'ils existent, sont appelés les opérateurs d'onde, et constituent le point de départ de la théorie de la diffusion. Le second problème ci-dessus est alors celui de l'existence des $\Omega_\pm^{-1}$: c'est le problème de la complétude asymptotique. On voit immédiatement qu'en général les limites (1.3) n'existent pas pour n'importe quelle condition initiale. En particulier, dans l'exemple 2, si φ_o est vecteur propre de H, $(H-\lambda)\varphi_o = 0$, alors

$$U_o(-t)U(t)\varphi_o = e^{-i\lambda t}U_o(-t)\varphi_o$$

et ceci n'a pas de limite (forte) dans $\mathcal{H}$ quand $t \to \pm\infty$.

Dans une expérience typique de diffusion, on dispose d'un accélérateur de particules qui produit un faisceau raisonnablement localisé dans l'espace et d'impulsion connue. On connaît donc φ_-. On bombarde une cible adéquate et on dispose des compteurs qui détectent les particules sortantes et éventuellement mesurent leur impulsion. On mesure donc φ_+, et la quantité intéressante est l'application $S : \varphi_- \to \varphi_+$, appelée opérateur de diffusion ou matrice S, et définie par :

$$S = \Omega_+^{-1} \circ \Omega_- . \tag{1.5}$$

Dans un modèle mathématique de diffusion, l'existence de S est une propriété non triviale. En général les $\Omega_\pm$, s'ils existent, sont injectifs ; la matrice S existe si leurs images $\mathcal{R}(\Omega_\pm) \equiv \Omega_\pm X$ satisfont l'inclusion

$$\mathcal{R}(\Omega_+) \supset \mathcal{R}(\Omega_-).$$

Souvent, l'évolution est invariante par une forme appropriée de renversement du temps, et cette inclusion est équivalente à l'inclusion opposée, et par suite à la condition

$$\mathcal{R}(\Omega_+) = \mathcal{R}(\Omega_-), \tag{1.6}$$

qui assure l'existence à la fois de S et de S^{-1}. Cette dernière égalité est une forme faible de la complétude asymptotique. On verra dans l'exemple de Schrödinger que ce n'est pas la définition la plus utile de cette notion.

Au présent niveau de généralité, on peut faire encore deux remarques sur les opérateurs d'onde. Tout d'abord, les opérateurs d'onde, s'ils existent, entrelacent l'évolution totale et l'évolution libre, en ce sens que pour tout $s \in \mathbb{R}$ (voir figure 1)

$$U(s)\Omega_\pm = \Omega_\pm U_o(s) \tag{1.7}$$

En effet

$$\begin{aligned} U(s)\Omega_\pm &= \lim_{t \to \pm\infty} U(s-t)\, U_o\, t) \\ &= \lim_{t \to \pm\infty} U(s-t)U_o(t-s)U_o(s) \\ &= \lim_{t \to \pm\infty} U(-t)U_o(t)U_o(s) = \Omega_\pm U_o(s), \end{aligned}$$

en changeant t-s en t.

D'autre part, les limites qui figurent dans (1.1), (1.2) et (1.3) ne peuvent pas être uniformes en φ dans les cas non triviaux. En effet, si on fixe à l'avance T, si grand soit-il, on peut toujours prendre φ_o suffisamment loin dans le passé sur une trajectoire fixe du mouvement total pour que $U(T)\varphi_o$ soit encore loin sur la branche entrante, tandis que φ_+ et $U_o(T)\varphi_+$ seront loin dans le passé sur la trajectoire libre asymptote à la branche sortante, si bien que $U(T)\varphi_o$ sera très différent de $U_o(T)\varphi_+$. Cette remarque servira plus loin de guide pour choisir la topologie dans laquelle on doit chercher les limites (1.1), (1.2) et (1.3).

§ 2. GENERALITES SUR LA DIFFUSION POUR L'EQUATION DE SCHRODINGER

On considère maintenant de façon plus précise l'exemple 2, où $X = \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$, l'évolution est décrite formellement par l'équation de Schrödinger

$$i\dot{\psi} = H \psi ,$$

et l'évolution libre par l'équation

$$i\dot{\psi} = H_o\psi ,$$

avec $H = H_o + V$, $H_o = P(-i \nabla)$ et $P \in \mathcal{C}^{\ell+1}(\mathbb{R}^n,\mathbb{R})$ pour un ℓ assez grand. Plus précisément H_o est l'opérateur autoadjoint défini par :

$$H_o = \mathcal{F}^{-1}P(k)\mathcal{F}$$

où $\mathcal{F}$ est la transformation de Fourier et on note $P(k)$ l'opérateur de multiplication par la fonction P de la variable k conjuguée de Fourier de x. Le cas du Laplacien $H_o = - \Delta$ correspond à $P(k) = k^2$. V sera par exemple l'opérateur de multiplication par une fonction réelle (encore notée V), mais pourra être plus généralement un opérateur différentiel à coefficients variables formellement hermitien.

Le premier problème qui se pose est de définir l'évolution totale $U(t)$. Par le théorème de Stone, il existe une correspondante biunivoque entre les groupes unitaires fortement continus à un paramètre $U(t) = \exp(-it H)$ et les opérateurs autoadjoints $H = H^*$. Ici, on dispose a priori d'un opérateur différentiel $\mathring{H}$, défini sur un domaine naturel $\mathcal{D}(\mathring{H})$, et hermitien. Par exemple, s P est à croissance polynomiale et $V \in L^2_{loc}$, on peut prendre $\mathcal{D}(\mathring{H}) = \mathcal{C}^\infty_o$ (l'indice zéro signifie à support compact). On est donc confronté au problème de la construction d'extensions auto-adjointes de $\mathring{H}$, ce qui pose un problème d'existence et d'unicité. Le problème d'existence est en général facile. Par exemple si P est paire, $P(k) = P(-k)$, et V la multiplication par une fonction réelle, alors $\overset{\circ}{H}$ est réel, c'est-à-dire commute avec la conjugaison complexe. Celle-ci échange les demi-plans Im z $\gtrless$ 0, donc les sous espaces de défaut, par suite les indices de défaut sont égaux et $\overset{\circ}{H}$ a des extensions auto-adjointes. Un autre cas où l'existence est immédiate est celui, fréquent, où $\overset{\circ}{H}$ est semi borné inférieurement. Le problème d'unicité est celui de déterminer si $\overset{\circ}{H}$ est essentiellement autoadjoint. Ce problème a fait l'objet d'études intensives, en particulier dans le cas où $H_o = -\Delta$. On donne ci-dessous pour illustration un résultat typique relatif à ce cas, dont les ingrédients essentiels sont dûs à Kato (voir par exemple [2] , page 185). Pour $p \geqslant 1$, on note $L^p_{loc.un.}$ (l'indice signifie local uniforme) l'ensemble des $f \in L^p_{loc}$ tels que la fonction de y

$$m_p(f;y) = \int_{B(y,1)} |f(x)|^p d^n x \tag{2.1}$$

où B(y,r) est la boule de centre y et de rayon r dans $\mathbb{R}^n$, soit bornée :

$$m_p(f;y) \leqslant \bar{m} < \infty \quad .$$

Théorème 2.1 : Soit $\overset{\circ}{H} = -\Delta + V$ défini sur $\mathcal{D}(\overset{\circ}{H}) = \mathcal{C}^\infty_o$. Soit $V_\pm = \mathrm{Max}(\pm V, 0)$. On suppose que $V_+ \in L^2_{loc}$ et $V_- \in L^p_{loc.un.}$ pour un p satisfaisant $p \geqslant 2$ si $n \leqslant 3$, $p > 2$ si $n = 4$, et $p \geqslant n/2$ si $n \geqslant 5$.

Alors $\overset{\circ}{H}$ est essentiellement auto-adjoint.

On suppose désormais choisi un opérateur autoadjoint H et on passe à l'étude du comportement asymptotique en temps du groupe unitaire U(t) engendré par H. Il résulte de la relation

$$R(\lambda) \equiv (H-\lambda)^{-1} = i \int_o^\infty dt\, U(t) \exp(it\lambda) \tag{2.2}$$

valable pour Im $\lambda > 0$, que la résolvante est la transformée de Fourier du groupe, donc que le comportement asymptotique en t de ce dernier est lié aux singularités locales de $R(\lambda)$ pour λ réel, c'est-à-dire aux propriétés spectrales de H. On étudie donc ces deux types de propriétés simultanément, et, pour formuler les problèmes de façon précise, on introduit d'abord quelques notations.

Soit H un opérateur autoadjoint. On note $\sigma(H)$ son spectre, $\sigma_d(H)$ l'ensemble des valeurs propres isolées de multiplicité finie (le spectre discret de H), $\sigma_p(H)$ l'ensemble des valeurs propres de H(le spectre ponctuel de H), et $\sigma_e(H) = \sigma(H) \setminus \sigma_d(H)$ (le spectre essentiel de H). A la partition du spectre

$$\sigma(H) = \sigma_d(H) \cup \sigma_e(H) \tag{2.3}$$

correspond une décomposition de $\mathcal{H}$ en somme directe de deux sous-espaces qui réduisent H :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_d \oplus \mathcal{H}_e. \tag{2.4}$$

Une autre décomposition intéressante de $\mathcal{H}$ est obtenue de la façon suivante. Soit $E(I)$ le projecteur spectral de H associé à un intervalle $I \subset \mathbb{R}$, et pour $\lambda \in \mathbb{R}$, soit $E(\lambda) = E((-\infty, \lambda])$. Pour chaque $\varphi \in \mathcal{H}$, la fonction $\|E(\lambda)\varphi\|^2$ est une fonction croissante de O à $\|\varphi\|^2$ et définit une mesure bornée sur la droite réelle

$$d\mu_\varphi(\lambda) = d\,\|E(\lambda)\varphi\|^2. \tag{2.5}$$

On note $\mathcal{H}_p$ (resp. $\mathcal{H}_{cs}$, resp. $\mathcal{H}_{ac}$) les sous-espaces de $\mathcal{H}$ formés des φ pour lesquels cette mesure est purement ponctuelle (resp. continue singulière, resp. absolument continue). Chacun de ces espaces réduit H, et $\mathcal{H}$ est la somme directe

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \oplus \mathcal{H}_{cs} \oplus \mathcal{H}_{ac} . \tag{2.6}$$

On note $\sigma_{cs}(H)$ (resp. $\sigma_{ac}(H)$) et on appelle spectre continu singulier (resp. absolument continu) de H le spectre de la restriction de H à $\mathcal{H}_{cs}$ (resp. $\mathcal{H}_{ac}$). A la décomposition (2.6) correspond la décomposition du spectre

$$\sigma(H) = \overline{\sigma_p(H)} \cup \sigma_{cs}(H) \cup \sigma_{ac}(H) \tag{2.7}$$

cette union n'ayant pas de raison d'être disjointe.

On peut faire une analyse semblable pour H_o. Dans tout ce qui suit, pour simplifier l'exposé, on supposera sans le repréter explicitement que H_o est purement absolument continu.

Dans les cas physiquement intéressants les plus simples, par exemple l'atome d'hydrogène où $H = -\Delta + V$ avec $V(x) = -|x|^{-1}$, on trouve que le spectre de H est formé d'une partie absolument continue $\sigma_{ac}(H) = \sigma_{ac}(H_o) = \mathbb{R}^+$ et d'un spectre discret $\sigma_d(H) \subset \mathbb{R}^-$. Les vecteurs propres dans $\mathcal{H}_d$ s'interprètent comme les états liés du système, et les valeurs propres correspondantes comme les niveaux d'énergie.

On revient maintenant au problème de la diffusion. La première question est l'existence des opérateurs d'onde (1.4) et on doit choisir la topologie dans laquelle chercher l'existence des limites. La topologie de la norme est exclue, car on a vu que la limite ne peut pas être uniforme en φ . On essaie donc (et ce choix s'avère bon a posteriori) la topologie forte, ce qu'on indique par la lettre s (pour strong). D'où la première question :

1) Montrer l'existence des opérateurs d'onde

$$\Omega = s - \lim_{t \to \pm\infty} U(-t)U_o(t) \tag{2.8}$$

Les opérateurs d'onde, s'ils existent, étant limites fortes d'opérateurs unitaires, sont isométriques : $\Omega_\pm^* \Omega_\pm = \mathbb{1}$. Par contre ils ne sont pas unitaires en général et leurs espaces images $\mathcal{R}(\Omega_\pm)$ sont non triviaux. Il résulte de l'entrelacement (1.7) que les $\mathcal{R}(\Omega_\pm)$ réduisent H et que les $\Omega_\pm$ réalisent deux équivalences unitaires de la décomposition spectrale de H_o dans $\mathcal{H}$ et de celle de H dans $\mathcal{R}(\Omega_\pm)$. Il en résulte en particulier que $\mathcal{R}(\Omega_\pm) \subset \mathcal{H}_{ac}$ et que $\sigma(H|_{\mathcal{R}(\Omega_\pm)}) = \sigma(H_o)$. Les vecteurs de $\mathcal{R}(\Omega_+) \cap \mathcal{R}(\Omega_-)$ ont une interprétation naturelle comme états de diffusion. On a également une interprétation physique des vecteurs de $\mathcal{H}_d$,et on aimerait s'assurer que dans des cas raisonnablement généraux on épuise ainsi l'espace $\mathcal{H}$. On fractionne ce problème en continuant la liste de questions de la façon suivante.

2) Déterminer $\sigma_e(H)$ et plus précisément s'assurer que $\sigma_e(H) = \sigma_e(H_o)$.

3) Montrer que $\sigma_{cs}(H) = \emptyset$

La question suivante concerne les valeurs propres contenues dans le spectre essentiel. Ces valeurs propres sont en général très instables par des perturbations de H, et dans le cas du problème à deux corps où V tend vers zéro à l'infini, il faut recourir à des potentiels un peu bizarres pour en produire. Par contre, dans le problème à 3 corps et plus, il est facile de construire des exemples où de telles valeurs propres apparaissent et on ne peut donc pas espérer les éliminer par des arguments très généraux.

Une question raisonnable est alors la suivante.

4) Montrer que $\sigma_p(H) \cap \sigma_e(H)$ est formé de valeurs propres "isolées" de multiplicité finie, à quelques exceptions près. (On donnera un énoncé précis dans le Théorème 3.1). Ici les guillemets signifient que ces valeurs propres sont isolées les unes des autres, mais évidemment pas du reste du spectre.

Enfin, on veut s'assurer que les états de diffusion épuisent le sous-espace absolument continu :

5) Montrer que :

$$\mathcal{R}(\Omega_+) = \mathcal{R}(\Omega_-) = \mathcal{H}_{ac} . \tag{2.9}$$

Cette dernière propriété est la complétude asymptotique, sous la forme appropriée au cas présent . La première égalité, déjà vue dans l'introduction (cf. (1.6)), suffit à assure l'existence de S et S^{-1}, mais en pratique on la démontre en montrant que chacun des deux termes coïncide avec $\mathcal{H}_{ac}$, et la version affaiblie (1.6) est sans intérêt intrinsèque.

On passe maintenant rapidement en revue l'état des réponses apportées aux questions (1) à (5) dans le cas d'une interaction à courte portée, c'est à dire dans le cas où V tend vers zéro à l'infini assez vite en un sens qui sera précisé plus loin. On renvoie à [3] pour plus de détails et pour la bibliographie.

La question (1) est facile et a reçu une réponse satisfaisante dès 1958 (Jauch, Cook, Kuroda [7]). Cette réponse a été améliorée en 1976 par Hörmander [10] . La question (2) est également facile. Les questions (3) à (5) sont difficiles. Elles ont été traitées avec succès par deux types de méthodes:

Les méthodes indépendantes du temps, ou stationnaires, où on élimine le groupe d'évolution par transformation de Fourier au profit de la résolvante, dont on analyse le comportement au voisinage de l'axe réel. Ces méthodes ont été développées depuis longtemps par de nombreux auteurs, en particulier Kato, Kuroda [8] , Birman, Agmon [9] . A cette classe de méthodes peut se rattacher la méthode d'analyticité par dilatation (Combes, Baslev, 1970; voir par exemple [6]) qui permet de traiter les questions (3) et (4) pour une classe particulière de potentiels.

Les méthodes dépendant du temps, où on travaille directement avec le groupe d'évolution U(t). A l'exception notable du théorème de Kato-Birman (voir par exemple [3] p.22-29) qui répond à la question (5) sans toucher à (3) et (4), cette classe de méthodes était relativement sous développée jusqu'à une date récente et ce n'est qu'en 1977 que l'équilibre avec les méthodes stationnaires a été rétabli à la suite des travaux de Enss (1977), complétés et améliorés par plusieurs auteurs (Simon, Mourre, Davies, 1978-79), qui donnent une réponse satisfaisante aux questions (3) à (5).

La suite de cet exposé est organisée de la façon suivante. Pour limiter le sujet, on ne dira rien de plus des méthodes stationnaires. Dans la fin de cette section, on présentera brièvement la réponse classique à la question (1) pour des potentiels à courte portée dans la version d'Hörmander, et un résultat de Weyl qui répond à la question (2). Cette présentation préparera le terrain pour la Section 3, dans laquelle on exposera les grandes lignes de la méthode de Enss qui répond aux questions (3) à (5).

On revient maintenant à la question (1), c'est à dire l'existence des opérateurs d'onde. En dérivant et intégrant formellement, on obtient

$$(U(-t)U_o(t) - \mathbb{1})\varphi = i\int_o^t d\tau\ U(-\tau)VU_o(\tau)\varphi\ , \tag{2.10}$$

et par suite l'existence de la limite forte du premier membre résulte de la convergence forte à l'infini de l'intégrale qui figure au second. Ceci conduit au lemme suivant.

<u>Lemme 2.1</u> : On suppose qu'il existe un sous-espace $\mathcal{D}$ dense dans $\mathcal{H}$, $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}(H_o) \cap \mathcal{D}(H)$, $\mathcal{D}$ stable par $U_o(.)$, tel que pour tout $\varphi \in \mathcal{D}$

$$\int_{\pm 1}^{\pm\infty} dt\ \| VU_o(t)\varphi\| < \infty \tag{2.11}$$

Alors les opérateurs d'onde (2.3) existent.

Il reste à trouver des conditions suffisantes sur V pour assurer l'hypothèse du lemme. On se limite au cas où V est l'opérateur de multiplication par une fonction réelle. On note $\hat{\varphi} = \mathcal{F}\varphi$ la transformée de Fourier d'une fonction φ .

<u>Théorème 2.2</u> : (Hörmander 1976). Soit $H_o = P(k)$, $P \in \mathcal{C}^{\ell+1}(\mathbb{R}^n,\mathbb{R})$ pour un ℓ assez grand, et tel que la matrice des dérivées secondes, notée $\nabla^2 P$, soit partout non dégénérée. Soit $V \in L^2_{loc}$ satisfaisant la condition

(H) Il existe $b > a > 0$ tels que

$$\int_1^\infty dt \left\{ \int_{a \leqslant |x| \leqslant b} |V(tx)|^2 d^n x \right\}^{1/2} < \infty \tag{2.12}$$

Soit H une extension autoadjointe de $\mathring{H} = H_o + V$ défini (par exemple) sur le domaine $\mathcal{D}(\mathring{H}) = \{\varphi : \hat{\varphi} \in \mathcal{C}_o^\infty\}$.

Alors les opérateurs d'onde (2.8) existent.

La preuve passe par l'intermédiaire du lemme 2.1 et consiste à démontrer (2.11) en combinant l'hypothèse (H) avec deux estimations de $U_o(t)\varphi$ obtenues par la méthode de la phase stationnaire, valables pour tout φ tel que $\hat{\varphi} \in \mathcal{C}_o^\ell$. La première est une estimation uniforme en x

$$|(U_o(t)\varphi)(x)| \leq C|t|^{-n/2} . \tag{2.13}$$

La seconde est une estimation en dehors des points de phase stationnaire et exprime que $U_o(t)\varphi$ est à décroissance aussi rapide que le permet la régularité de P en dehors des trajectoires du mouvement classique associé au hamiltonien P(k). Soit $v(k) = \nabla P(k)$ la vitesse classique. Pour $B \subset \mathbb{R}^n$, B compact, et $x \notin B$, on note d(x,B) la distance de x à B. On peut alors montrer l'estimation suivante.

<u>Lemme 2.2</u> : Soit H_o comme dans le théorème 2.2. Soit φ tel que $\hat{\varphi} \in \mathscr{C}_o^\infty$, $K = \mathrm{Supp}\ \hat{\varphi}$ et B l'ensemble des vitesses classiques permises pour φ :

$$B \equiv v(K) \equiv \{u \in \mathbb{R}^n : \exists\ k \in K \text{ tel que } v(k) = u\} \tag{2.14}$$

(B est compact).

Alors pour x, t tels que $x \notin tB$, $U_o(t)\varphi$ satisfait la majoration

$$|(U_o(t)\varphi)(x)| \leq C\ d(x,tB)^{-\ell} \tag{2.15}$$

avec une constante C dépendant de φ mais uniforme en x et t pour $d(\frac{x}{t},B) \geq b > 0$.

Dans la preuve du théorème 2.2, on utilise l'estimation (2.15), entre autres, pour $\frac{x}{t}$ dans un voisinage de l'origine, et on doit donc se limiter à des φ tels que $\mathrm{Supp}\ \hat{\varphi} \cap S = \emptyset$, où S est l'ensemble des points de vitesse nulle

$$S = \{ k : v(k) = 0 \} . \tag{2.16}$$

L'hypothèse $\nabla^2 P$ non dégénérée entraîne que S est formé de points isolés.

L'hypothèse (H) du théorème exprime que V décroit suffisamment vite à l'infini. Il est instructif de la comparer à la famille de conditions suivante, pour $m \in \mathbb{R}$:

$$(K_m) \qquad \int |V(x)|^2 (1+x^2)^{-m/2} < \infty . \tag{2.17}$$

On voit facilement que pour $V \in L^2_{loc}$ et pour tout $\varepsilon > 0$,

$$(K_{n-2-\varepsilon}) \Rightarrow (H) \Rightarrow (K_{n-2}) . \tag{2.18}$$

L'hypothèse $(K_{n-2-\varepsilon})$ est celle qui figurait dans les versions du théorème 2.2

antérieures à celle de Hörmander. Dans le cas particulier où $V(x) = (1+|x|)^{-\gamma}$, la condition (H) et la condition $(K_{n-2-\varepsilon})$ pour un $\varepsilon > 0$ sont équivalentes à $\gamma > 1$. Le potentiel doit décroitre à l'infini strictement plus vite que le potentiel coulombien $|x|^{-1}$. Il ne s'agit pas là d'une faiblesse technique de la méthode de preuve, mais d'une limitation fondamentale. Pour des potentiels décroissant en $|x|^{-1}$ ou plus lentement, les opérateurs d'onde (2.8) n'existent pas, et on doit modifier la théorie. On renvoie à la littérature pour ce point.

On conclut cette section en citant un résultat de Weyl qui répond à la question (2). On note $R(z) = (H-z)^{-1}$ et $R_o(z) = (H_o - z)^{-1}$ les résolvantes de H et H_o.

<u>Théorème 2.3</u> : Soient H et H_o autoadjoints tels que $R(z) - R_o(z)$ soit compact pour un (ou pour tout) $z \in \mathbb{C}\setminus\mathbb{R}$. Alors $\sigma_e(H) = \sigma_e(H_o)$.

On renvoie à [4], pp. 106-120 et à [11], proposition 2.2, pour diverses généralisations et démonstrations. L'hypothèse du théorème 2.3 est très maniable. En effet

$$R(z) - R_o(z) = -R(z)\ V\ R_o(z) \tag{2.19}$$

Si on peut mettre V sous la forme d'une somme finie de produits A^*B, il suffit de montrer que $AR(z)$ est borné et $BR_o(z)$ compact. La première propriété est souvent une conséquence immédiate de la définition de H, et la seconde facile à vérifier. Par exemple, si $H_o = -\Delta$ et si B est l'opérateur de multiplication par une fonction réelle, par exemple $|V|^{1/2}$, alors $BR_o(z)$ est compact si $B \in L^p_{loc}$ pour les valeurs de p données dans le théorème 2.1 et si en outre $m_p(B;y) \to 0$ quand $|y| \to \infty$ (cf. (2.1)).

§ 3. <u>LA METHODE DEPENDANT DU TEMPS DE ENSS</u>

Dans cette section on expose les grandes lignes de la méthode développée par Enss pour répondre aux questions (3) à (5) de la Section 2. Cet exposé est un résumé de l'article [11], auquel on renvoie pour le détail des preuves et pour des commentaires bibliographiques.

On fait les hypothèses suivantes sur H_o et H.

(H_1) Le hamiltonien libre est de la forme $H_o = P(-i\nabla)$ où $P \in \mathcal{C}^{\ell+1}(\mathbb{R}^n,\mathbb{R})$ pour un ℓ assez grand (il suffit que $\ell \geqslant n+2$) et $P(k) \to +\infty$ quand $|k| \to \infty$.

Soit S l'ensemble des points où la vitesse classique est nulle (cf. (2.16)). S est fermé, et on voit facilement que P(S) aussi est fermé. La théorie ne donnera pas d'information sur la partie du spectre de H contenue dans P(S). Pour avoir des énoncés simples, on suppose P(S) trop petit pour porter du spectre continu, par exemple : P(S) est dénombrable.

(H_2) Le hamiltonien total H est un opérateur autoadjoint tel que pour un (ou pour tout) $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, $R(z) - R_o(z)$ est compact.

Cette hypothèse a pour but de contrôler les singularités locales de $V = H - H_o$. Elle entraîne que V est bien défini comme forme sesquilinéaire sur $\mathcal{D}(H) \times \mathcal{D}(H_o)$. (On ne suppose pas V défini comme opérateur). De plus, par le théorème 2.3, $\sigma_e(H) = \sigma_e(H_o)$.

La troisième hypothèse exprime que V décroit plus vite que $|x|^{-1}$ à l'infini et remplace ici l'hypothèse (H) du théorème 2.2.

(H_3) Il existe une fonction $g \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^n)$, $|g| \geqslant 1$, telle que pour tout intervalle borné I

$$h_I(r) \equiv \| E(I)\ V\ g(-i\nabla)^{-1}\ F(|x| \geqslant r)\| \in L^1(\mathbb{R}^+, dr) \tag{3.1}$$

où F(.) est l'opérateur de multiplication par la fonction caractéristique de l'ensemble défini entre parenthèses (ici, l'extérieur de la boule B(O,r)).

On vérifie que pour $V(x) = (1 + |x|)^{-\gamma}$, on peut prendre $g = 1$ et (H_3) se réduit encore à $\gamma > 1$.

On peut alors énoncer le résultat.

<u>Théorème 3.1</u> : Sous les hypothèses (H_1), (H_2) et (H_3),

1) Les opérateurs d'onde existent,
2) $\sigma_e(H) = \sigma_e(H_o)$,
3) $\sigma_{cs}(H) = \emptyset$,
4) Le spectre ponctuel de H dans $\mathbb{R} \setminus P(S)$ est formé de valeurs propres "isolées" de multiplicités finies, ne pouvant s'accumuler que sur P(S).
5) La complétude asymptotique est satisfaite (cf. (2.9)).

On ne reviendra pas sur la preuve de la partie (1), qui est très voisine de celle du théorème 2.2. La partie (2) résulte de (H_2) et du théorème 2.3. Les parties (3) à (5) se démontrent ensemble, et on va expliquer l'idée générale de la preuve sur le cas de (5).

On considère donc un vecteur $\varphi \in \mathcal{H}_{ac}$ et on explore le spectre de H par intervalles bornés successifs, c'est-à-dire qu'on suppose que $\varphi \in \mathcal{R}(E(I))$ pour un intervalle borné I. Soit $\varphi(t) = U(t)\varphi$. On remarque tout d'abord que quand $t \to \pm\infty$, $\varphi(t)$ s'éloigne à l'infini, en ce sens que pour tout $R > 0$,

$$F(|x| \leqslant R)\varphi(t) \longrightarrow 0, \quad (t \longrightarrow \pm\infty). \tag{3.2}$$

En effet, $\varphi(t)$ tend faiblement vers zéro (notation : $\varphi(t) \rightharpoonup 0$) car pour tout $\psi \in \mathcal{H}$,

$$<\psi,\varphi(t)> = \int e^{-i\lambda t} \, d<\psi ,E(\lambda)\varphi> \to 0 \tag{3.3}$$

par le lemme de Riemann-Lebesgue et l'hypothèse $\varphi \in \mathcal{H}_{ac}$. D'autre part, puisque $\varphi \in \mathcal{R}(E(I))$

$$F(|x| \leqslant R)\varphi(t) = \{F(|x| \leqslant R)E(I)\} \varphi(t) \tag{3.4}$$

Si on avait $E_o(I)$ au lieu de $E(I)$, l'opérateur entre accolades serait compact, ce qui entrainerait (3.2). On passe facilement de $E(I)$ à $E_o(I)$ en utilisant l'hypothèse (H_2).

Pour $|t|$ grand, par exemple t grand et positif, et à une petite erreur près, $\varphi(t)$ est donc concentré loin du centre diffuseur et évolue donc à peu près selon l'évolution libre U_o. Par suite, $\varphi(t)$ reste concentré au voisinage des trajectoires classiques engendrées par le hamiltonien libre, en un sens exprimé quantitativement par l'estimation (2.15). Autrement dit, pour t grand, $U(s)\ \varphi(t) \sim U_o(s)\varphi(t\ )$ est concentré au voisinage de points du type $x + sv(k)$ où x est loin du centre diffuseur et $v(k) \in \text{Supp}\ \widehat{\varphi(t)}$. Cette image persiste tant que s est assez petit pour que la trajectoire classique $x + sv(k)$ ne revienne pas au voisinage du diffuseur, typiquement s petit devant t.

Ceci suggère d'effectuer une décomposition de $\varphi(t)$ en partie sortante $\varphi_+(t)$ et partie entrante $\varphi_-(t)$ en imposant la condition que $x.v(k) \gtrless 0$ pour $x \in \text{Supp}\ \varphi_\pm(t)$ et $k \in \text{Supp}\ \widehat{\varphi_\pm(t)}$. Il en résultera que les trajectoires classiques $x + sv(k)$ associées à $\varphi_\pm(t)$ ne pourront jamais revenir vers le centre diffuseur pour $s \gtrless 0$, et par suite que

$$U(s)\ \varphi_\pm(t) \sim U_o(s)\ \varphi_\pm(t) \quad \text{pour t grand, et } s \gtrless 0 \tag{3.5}$$

cette fois sans restriction sur la grandeur de $|s|$. Une conséquence immédiate de (3.5) est que

$$\Omega_\pm \varphi_\pm(t) \sim \varphi_\pm(t), \tag{3.6}$$

c'est-à-dire, de façon plus utilisable,

$$(\Omega_\pm - \mathbb{1})\,\varphi_\pm(t) \xrightarrow[|t|\to\infty]{} 0. \tag{3.7}$$

Par suite

$$\begin{aligned}\varphi &= U(-t)\varphi(t)\\ &\sim U(-t)(\varphi_+(t) + \varphi_-(t))\\ &\sim U(-t)(\Omega_+\varphi_+(t) + \Omega_-\varphi_-(t))\\ &= \Omega_+U_0(-t)\varphi_+(t) + \Omega_-U_0(-t)\varphi_-(t),\end{aligned} \tag{3.8}$$

ce qui tend à montrer que

$$\mathcal{H}_{ac} \subset \mathcal{R}(\Omega_+) + \mathcal{R}(\Omega_-), \tag{3.9}$$

où + signifie enveloppe linéaire. Pour achever la démonstration de la complétude asymptotique, il suffit d'un argument supplémentaire assurant que $\varphi_\pm(t) \to 0$ quand $t \to \mp\infty$ (noter les signes croisés), c'est à dire que $\varphi(t)$ est presque entièrement sortant (resp. entrant) dans le futur (resp. le passé) lointain.

Il reste à effectuer la construction de $\varphi_\pm(t)$ satisfaisant (3.7). Pour cela, il est naturel de chercher deux opérateurs $R_\pm$ tels que $R_+ + R_- \sim \mathbb{1}$, à partir desquels on définira $\varphi_\pm(t) = R_\pm\,\varphi(t)$. Comme on sait déjà que $\varphi(t) \longrightarrow 0$, $|t| \to \infty$, on obtiendra (3.7) si on peut montrer que $(\Omega_\pm - 1)R_\pm$ est compact.

Ceci conduit au lemme suivant.

<u>Lemme 3.1</u> : Soit I un intervalle compact. On suppose qu'il existe deux opérateurs bornés $R_\pm$ (pouvant dépendre de I) tels que

(a) les opérateurs $(\Omega_\pm - \mathbb{1})R_\pm$ sont compacts,

(b) L'opérateur $R_0E(I)$ est compact, où $R_0 = 1 - R_+ - R_-$.

Alors

(1) $\sigma_{cs}(H) \cap I = \emptyset$

(2) $\sigma_p(H) \cap I$ consiste en valeurs propres isolées de multiplicités finies,

(3) $E(I)\,\mathcal{H}_{ac} = E(I)\,\mathcal{R}(\Omega_+) + E(I)\,\mathcal{R}(\Omega_-)$.

Si on suppose en outre

(c) $\displaystyle \underset{t\to\mp\infty}{s-\lim}\, R_\pm U(t)E_{ac} = 0$,

alors

(4) $E(I)\,\mathcal{R}(\Omega_+) = E(I)\,\mathcal{R}(\Omega_-) = E(I)\,\mathcal{H}_{ac}$.

Dans l'hypothèse (c), noter que les signes sont croisés. E_{ac} est le projecteur sur $\mathcal{H}_{ac}$.

Pour démontrer le théorème 3.1, il suffira de construire pour chaque intervalle I disjoint de P(S), deux opérateurs $R_{\pm}$ satisfaisant les hypothèses (a) (b) et (c) du lemme 3.1. On va maintenant esquisser cette construction, ainsi que la preuve de la propriété essentielle qui est (a). On remarque tout d'abord que sous la seule hypothèse (H_2), l'opérateur suivant est compact pour tout couple d'intervalle bornés I_o, I_1 :

$$E(I_1)(U(-t)U_o(t) - 1)E_o(I_o) = i\int_o^t d\tau\, U(-\tau)E(I_1)\, V\, E_o(I_o)U_o(\tau), \tag{3.10}$$

car l'intégrand du second membre est compact et continu en norme par rapport à τ. L'intégrale qui figure au second membre ne converge pas en norme quand t tend vers l'infini, car une telle convergence impliquerait l'existence des $\Omega_{\pm}$ comme limites en norme, ce qui est faux. Si on revient alors au contre exemple donné à la fin de la section 1, on s'aperçoit qu'il consiste à étudier la limite donnant Ω_+ appliquée à un φ du type entrant, c'est-à-dire du type φ_-, et que l'objection ne s'applique pas à un φ sortant. Ceci suggère la méthode adéquate pour démontrer l'hypothèse (a) du lemme 3.1 : on esaiera de montrer que l'intégrale du second membre de (3.10) converge en norme quand $t \to \pm\infty$ après multiplication de l'intégrand à droite par $R_{\pm}$, les signes se correspondant. La démonstration, comme celle du théorème 2.2 utilisera l'estimation (2.15) et on devra encore exclure les points où la vitesse classique s'annule. Pour cela, on utilisera (3.10) avec un intervalle I_o disjoint de P(S). Pour faire apparaître les opérateurs $(\Omega_{\pm} - \mathbb{1})R_{\pm}$, on imposera en outre la condition $E_o(I_o)R_{\pm} = R_{\pm}$, qui exprime que les opérateurs $R_{\pm}$ réalisent une localisation en énergie cinétique. Pour que cette localisation soit compatible avec le fait que $R_+ + R_- = \mathbb{1}$ sur $\mathcal{R}(E(I))$, on devra prendre en outre $I \subset I_o$. Ceci conduit à la construction suivante. On part d'un intervalle I compact disjoint de P(S), on choisit un intervalle I_o disjoint de P(S) tel que $I \subset\subset I_o$ et une fonction $f \in \mathcal{C}_o^{\infty}(\mathbb{R})$, Supp $f \subset I_o$, $0 \leqslant f \leqslant 1$, $f = 1$ sur I, et on cherche $R_{\pm}$ sous la forme

$$R_{\pm} = f(H_o)P_{\pm}\, f(H_o), \tag{3.11}$$

où $P_{\pm}$ sont deux opérateurs bornés satisfaisant $P_+ + P_- = \mathbb{1}$. On voit facilement que cette définition assure l'hypothèse (b) du lemme 3.1, et il reste à construire les opérateurs $P_{\pm}$, qui sont chargés d'effectuer la décomposition associée aux conditions $x.v(k) \gtrless 0$. Il existe actuellement deux méthodes de construction. L'une consiste à prendre pour $P_\pm$ les projecteurs spectraux, associés aux demi-axes $\mathbb{R}^\pm$, d'un opérateur autoadjoint analogue à l'opérateur

$$A = x.v(-i\nabla) + v(-i\nabla).x$$

Cette méthode a été proposée par Mourre et reprise par Yafaev dans le cas où $H_0 = -\Delta$, i.e. $P(k) = k^2$. Elle se généralise de façon assez explicite au cas où P est à symétrie sphérique, $P(k) = P_1(|k|)$ et modulo un découpage de l'espace des impulsions, au cas général. La deuxième est la méthode originale de Enss, améliorée par Davies, et passe par une localisation approchée dans l'espace de phase classique $\mathbb{R}^{2n}$. On renvoie à [11] pour une description détaillée. Dans tous les cas, la convergence en norme de l'intégrale qui représente $(\Omega_\pm - \mathbb{1})R_\pm$ est déduite d'une estimation non triviale du type suivant :

Il existe $b > 0$, $C \geqslant 0$ et $\gamma > 1$ tels que

$$\|F(|x| \leqslant b|t|)U_0(t)g(-i\nabla)f(H_0)P_\pm\| \leqslant C|t|^{-\gamma} \tag{3.12}$$

pour $\pm t \geqslant 1$ (les signes se correspondant), où g est la fonction qui figure dans l'hypothèse (H_2), et f celle qui figure dans (3.11). Cette estimation est elle-même déduite de l'estimation (2.15), et la localisation $x.v(k) \gtrless 0$ contenue dans $P_\pm$ sert à exclure que les trajectoires classiques permises par $g(-i\nabla)f(H_0)P_\pm$ puissent revenir au bout du temps t dans la boule $B(0,b|t|)$. On renvoie à [11] pour le détail des démonstrations.

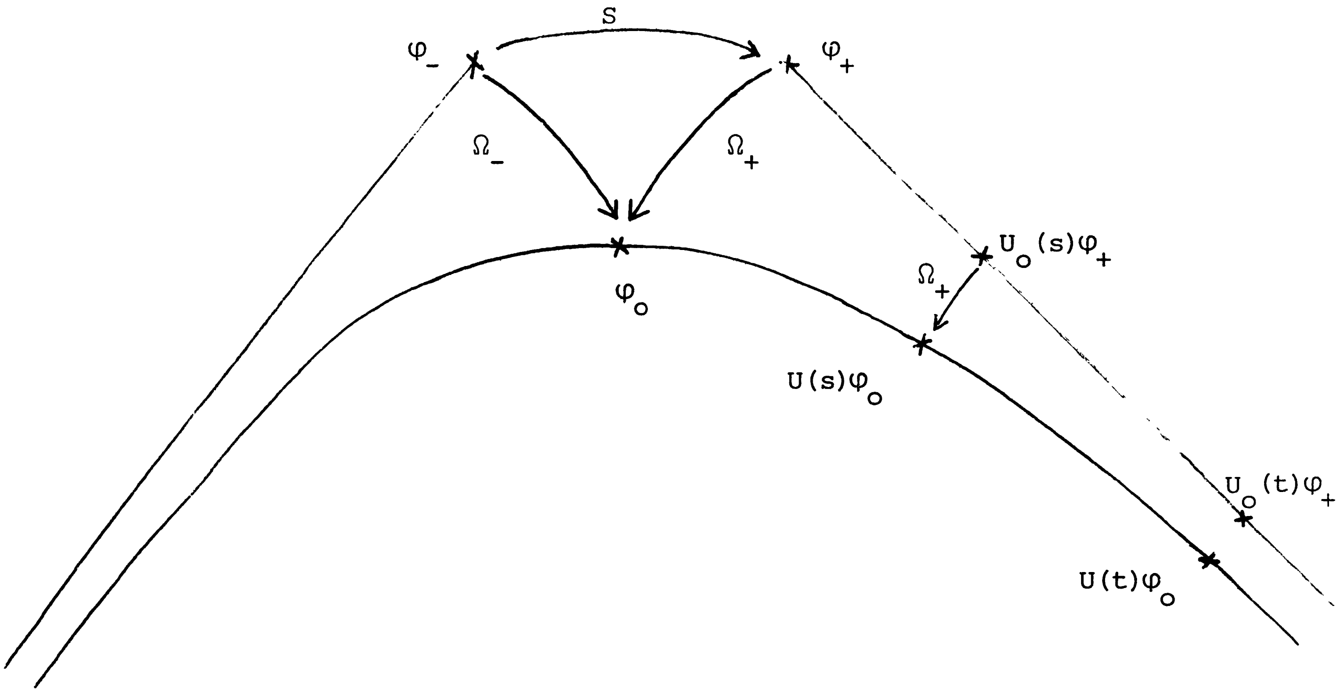

Figure 1

Références

Etant donné le caractère général de cet exposé, on cite seulement quelques livres et articles de revue, et on renvoie à leurs bibliographies pour la référence aux articles originaux.

Livres

[1] T. Kato : Perturbation Theory for Linear Operators, Springer, Berlin, 1966, en particulier Chapitre X.

[2] M. Reed, B. Simon : Methods of modern mathematical Physics, Academic Press, New York.
II. Fourier Analysis, Self adjointness, 1975.

[3] Idem, III, Scattering Theory, 1979.

[4] Idem, IV, Analysis of Operators, 1978.

[5] W. Amrein, J. M. Jauch, K. Sinha, Scattering theory in quantum mechanics, Benjamin, New York, 1977.

[6] Scattering theory in Mathematical Physics, édité par J. A. Lavita, J. P. Marchand, Reidel, Dordrecht, 1974.

Articles de revue ou d'intérêt général

[7] S. T. Kuroda, Nuov. Cim. XII, 431-453, 1959.

[8] T. Kato, S. T. Kuroda, Rocky Mountain J. Math. 1, 127-171,1971.

[9] S. Agmon, Ann. Scuol. Norm. Sup. Pisa, Ser. IV, 2, 151-218, 1975.

[10] L. Hörmander, Math. Zeit. 146, 69-91, (1976).

La troisième partie du présent exposé est basée sur

[11] J. Ginibre : La méthode dépendant du temps dans le problème de la complé-tude asymptotique, prétirage Orsay LPTHE 80/10 et Comptes rendus de la RCP 25, IRMA, Strasbourg.

*
* *
*