

# SÉMINAIRE ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES – ÉCOLE POLYTECHNIQUE

F. NIER

## **Une description semi-classique de la diffusion quantique**

*Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)* (1994-1995), exp. n° 8, p. 1-8

[http://www.numdam.org/item?id=SEDP\\_1994-1995\\_\\_\\_A8\\_0](http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1994-1995___A8_0)

© Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)  
(École Polytechnique), 1994-1995, 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/>

*CENTRE  
DE  
MATHEMATIQUES*

Unité de Recherche Associée D 0169

ECOLE POLYTECHNIQUE

F-91128 PALAISEAU Cedex (FRANCE)

Tél. (1) 69 33 40 91

Fax (1) 69 33 30 19 ; Télex 601.596 F

Séminaire 1994-1995

---

## EQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES

### **UNE DESCRIPTION SEMI-CLASSIQUE DE LA DIFFUSION QUANTIQUE**

**F. NIER**



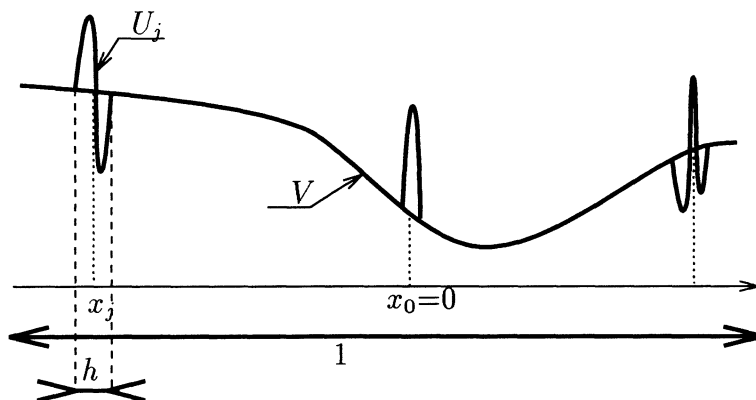
# 1 Introduction

Nous nous intéressons ici à un problème d'évolution semi-classique avec perturbation singulière. Il s'agit d'un cas critique où il n'y a plus de calcul asymptotique et pour lequel l'évolution limite garde trace d'effets purement quantiques. Il fournit une description de la diffusion quantique en adéquation avec l'approche des physiciens sur les phénomènes de collisions.

Plus précisément nous considérons l'équation de Schrödinger dans  $\mathbb{R}^d$  avec petit paramètre  $h \rightarrow 0$

$$(1.1) \quad \begin{cases} ih\partial_t u^h = \left[ -\frac{h^2}{2}\Delta + V(x) + \sum_{j \in \mathbb{N}} U_j\left(\frac{x-x_j}{h}\right) \right] u^h \\ u^h(t=0) = u_0^h. \end{cases}$$

L'asymptotique de cette équation sera décrite dans l'espace des phases en termes de mesures semi-classiques [6][7][8]. Le petit paramètre provient de la comparaison de deux échelles : une échelle macroscopique associée aux variations du potentiel  $V$  et aux distances entre les "sites collisionnels" repérés par les positions  $x_j$ , et une échelle microscopique ou quantique dans laquelle se concentrent les potentiels de profils  $U_j$  autour des  $x_j$ .



Allure du potentiel complet.

**Hypothèses :** a) Les potentiels  $U_j(x)$  sont uniformément bornés dans  $S(\langle x \rangle^{-\mu}, \frac{dx^2}{\langle x \rangle^2})$  avec  $\mu > 1$ .

b) Les points  $x_j, j \in \mathbb{N}$ , sont répartis de telle sorte que

$$\sum_{j \in \mathbb{N}} \langle x_j \rangle^{-\mu} < \infty.$$

c) Le potentiel  $V(x)$  appartient à  $S(1, dx^2)$ .

Pour des raisons de commodité, nous supposons également  $x_0 = 0$  et  $V(0) = 0$ . Les hypothèses précédentes assurent la réalisation du hamiltonien  $H^h = -\frac{h^2}{2}\Delta + V(x) +$

$\sum_{j \in \mathbb{N}} U_j(\frac{x-x_j}{h})$  comme opérateur auto-adjoint ainsi que l'existence et la complétude asymptotique des opérateurs d'onde

$$W_{\pm, j} = \lim_{t \rightarrow \mp \infty} e^{it(-\frac{1}{2}\Delta + U_j(x))} e^{-it(-\frac{1}{2}\Delta)}.$$

**Notations :** Nous notons  $S_j = W_{+, j}^* W_{-, j}$  la matrice de diffusion de  $-1/2\Delta + U_j$  par rapport à  $-1/2\Delta$  et  $\hat{S}_j = F S_j F^{-1}$  son conjugué par la transformée de Fourier  $F$ . Pour  $j = 0$  nous écrirons simplement  $U, W_+, W_-, S$  et  $\hat{S}$  au lieu de  $U_0, W_{+, 0}, W_{-, 0}, S_0$ . Enfin  $\Phi_V(t)$  désignera le flot classique dans  $T^*\mathbb{R}^d$  associé au hamiltonien  $p_V(x, \xi) = \frac{1}{2}|\xi|^2 + V(x)$ .

## 2 Résultats

Notre résultat principal concerne des solutions de (1.1) associées à des données initiales particulières de la forme  $u_0^h = D^h u_0 = h^{-d/2} u_0(\frac{x}{h})$  avec  $u_0 \in Im W_+ = Im W_-$ . Nous écrivons la donnée  $u_0$  sous la forme  $u_0 = W_+ F^{-1} \psi_+ = W_- F^{-1} \psi_-$ , les fonctions  $\psi_+$  et  $\psi_-$  étant reliées par  $\psi_+ = \hat{S} \psi_-$ . Nous reviendrons en Section 3 sur les raisons de ce choix.

**Theorème 2.1** *On suppose qu'il existe  $T_+ > 0$  et  $T_- > 0$  tels que*

$$(2.1) \quad \forall t, \pm t \in (0, T_{\pm}), \quad \Phi_V(\pm t) [\{0\} \times \text{supp } \psi_{\pm}] \cap \left( \bigcup_{j \in \mathbb{N}} T_{x_j}^* \mathbb{R}^d \right) = \emptyset$$

*Alors pour tout  $t \in (-T_-, 0) \cup (0, T_+)$  la suite  $(u^h(t))_h$  admet une unique mesure semi-classique quand  $h \rightarrow 0$ ,*

$$(2.2) \quad \mu(t) = \begin{cases} \Phi_V(t)_* \left[ (2\pi)^{-d} \delta_{x=0} |\psi_-(\xi)|^2 \right], & \text{si } t \in (-T_-, 0) \\ \Phi_V(t)_* \left[ (2\pi)^{-d} \delta_{x=0} |\psi_+(\xi)|^2 \right], & \text{si } t \in (0, T_+). \end{cases}$$

**Remarque 2.1** *a) En fait la condition (2.1) n'est pas trop restrictive. Si l'on pose  $(x(t), \xi(t)) = \Phi_V(t)(0, \xi_0)$ , on a pour  $t$  petit*

$$(2.3) \quad \frac{d}{dt}(x(t) \cdot \xi(t)) = |\xi(t)|^2 - x(t) \cdot \partial_x V(x(t)) \sim |\xi_0|^2.$$

*En conséquence, on peut trouver un  $T_+ > 0$  et un  $T_- > 0$  dès que  $\psi_{\pm}$  est à support compact dans  $\mathbb{R}^d \setminus \{0\}$ .*

*b) Il y a une totale symétrie entre  $t > 0$  et  $t < 0$  et dans les preuves il suffit de considérer le cas  $t > 0$ .*

**Idée de la preuve :** Nous faisons appel à deux notions : 1) La régularité des opérateurs d'onde à courte portée [4], à savoir

$$(2.4) \quad p_{\pm}^W(x, D) \chi(-1/2\Delta + U) W_{\pm} = p_{\pm}^W(x, D) \chi(-1/2\Delta + U) + q_{\pm}^W(x, D)$$

$$(2.5) \quad \text{et} \quad W_{\pm} \chi(-1/2\Delta) p_{\pm}^W(x, D) = \chi(-1/2\Delta) p_{\pm}^W(x, D) + r_{\pm}^W(x, D)$$

où  $r_{\pm}, q_{\pm} \in S(\langle \xi \rangle^{-\infty} \langle x \rangle^{1-\mu}, g_1)$  et où  $p_+^W(x, D)$  (resp.  $p_-^W(x, D)$ ) est une troncature microlocale supportée dans le cône sortant (resp. entrant). 2) La seconde microlocalisation autour du conormal à l'origine  $x = 0$  qui intervient de deux manières. D'une part la deuxième métrique déduite de la métrique semi-classique  $dx^2 + h^2 d\xi^2$  suivant le procédé de [2] est  $\frac{h^{-2} dx^2}{(h^{-2} x)^2} + h^2 d\xi^2$ , ce qui donne après conjugaison par les dilatations,  $(x, h\xi) \rightarrow (hx, \xi)$ , la métrique  $g_1 = \frac{dx^2}{x^2} + d\xi^2$  naturelle pour l'étude de la diffusion. Cette construction de [2] a ici une traduction simple :  $a(hx, \xi)$  est uniformément borné dans  $S(1, g_1)$  quand  $a \in \mathcal{C}_0^\infty(T^*\mathbb{R}^d)$ . D'autre part on a recourt à des troncature 2-microlocale autour de  $x = 0$  pour séparer cône entrant et cône sortant et exploiter (2.4)(2.5). Notons que les opérateurs d'onde, et de manière équivalente la matrice  $S$  compte tenu de la relation  $W_+\chi(-1/2\Delta) = W_+\chi(-1/2\Delta)p_+ + W_+\chi(-1/2\Delta)p_- = W_+\chi(-1/2\Delta)p_+ + S^*W_-^*\chi(-1/2\Delta)p_-$  ne sont globalement pas des pseudos.

La démonstration se fait en deux étapes. Premièrement on utilise la relation d'entrelacement  $W_{\pm}^*[-1/2\Delta + U]W_{\pm} = -1/2\Delta$  pour remplacer le hamiltonien  $-h^2/2\Delta + V(x) + U(\frac{x}{h})$  par  $-h^2/2\Delta + V(x)$ . Deuxièmement à l'échelle quantique, on déforme le hamiltonien  $-1/2\Delta + V(hx) + U(x)$  en  $-1/2\Delta + U$  à l'aide de transformations canoniques envoyant  $1/2|\xi|^2 + V(x)$  sur  $1/2|\xi|^2$  (au moins dans un domaine compact d'énergies non nulles). Ces transformations canoniques sont construites de façon à coïncider avec l'identité sur le conormal à l'origine. Ainsi les opérateurs Fourier intégraux associés après conjugaison par les dilatations sont presque des pseudos dans  $OpS(1, g_1)$ . Cette partie de la démonstration, un peu, technique pourrait sans doute se simplifier dans le cadre des travaux récents de J.M. Bony [1] et de ses prolongements à venir.

Enfin le raccord entre les deux échelles se fait en introduisant un petit paramètre intermédiaire  $\varepsilon$ . On a alors des estimations en  $O(\varepsilon) + o_\varepsilon(h^0)$ . Par passage à la limite  $h \rightarrow 0$  puis  $\varepsilon \rightarrow 0$ , on obtient des minoration de la mesure semi-classique  $\mu(t)$ , toutes les zones de l'espace des phases n'ayant pas été explorées puisque (on ne sait pas ce qu'il se passe dans les cônes entrant pour  $W_+$  par exemple). On conclut en utilisant l'information a priori  $\int \mu = 1$ .  $\square$

Le Théorème 2.1 sépare asymptotiquement les évolutions associées aux hamiltoniens quantiques  $-h^2/2\Delta + V(x)$  et  $-1/2\Delta + U(x)$  (notons au passage que les potentiels  $U_j$ ,  $j \in \mathbb{N}$  se découpent également) et assure leur raccordement en  $x = 0$ . Ce raccordement est plus clair en faisant appel à des mesures semi-classiques 2-micro-localisées autour de  $x = 0$ , portées par  $X = (T^*\mathbb{R}^d \setminus T_0^*\mathbb{R}^d) \cup S_{T_0^*\mathbb{R}^d}(T^*\mathbb{R}^d) \sim [0, +\infty) \times S^{d-1} \times \mathbb{R}^d$ . Ces mesures s'identifient au mesures semi-classiques usuelles en dehors de  $r = 0$ , tandis que la composante portée par  $r = 0$  décrit microlocalement le défaut de compacité de la suite dilatée. Pour plus de détails sur cette notion, nous renvoyons à la thèse de C. Fermanian-Kammerer [5].

**Corollaire 2.2** *Sous les mêmes hypothèses qu'au Théorème 2.1, la suite  $(u^h(t))_h$ ,  $t \in (-T_-, 0) \cup (0, T_+)$ , admet une unique mesure 2-micro-localisée  $\mu(t)$  s'identifiant à (2.2).*

De plus cette mesure satisfait dans  $\mathcal{M}_b(X)$

$$(2.6) \quad \omega^* - \lim_{t \rightarrow 0^+} \mu(t) = (2\pi)^{-d} \delta_{r=0} \delta_{\theta=\frac{\xi}{|\xi|}} |\psi_+(\xi)|^2,$$

$$(2.7) \quad \omega^* - \lim_{t \rightarrow 0^-} \mu(t) = (2\pi)^{-d} \delta_{r=0} \delta_{\theta=-\frac{\xi}{|\xi|}} |\psi_-(\xi)|^2.$$

**Remarque 2.3** En fait les mesures  $(2\pi)^{-d} \delta_{\theta=\frac{\xi}{|\xi|}} |\psi_+(\xi)|^2$  et  $(2\pi)^{-d} \delta_{\theta=-\frac{\xi}{|\xi|}} |\psi_-(\xi)|^2$  sont exactement les mesures de défaut microlocales en métrique  $g_1 = \frac{dx^2}{(x)^2} + d\xi^2$  des suites  $(e^{-it(-1/2\Delta+U)}u_0)$  pour  $t \rightarrow +\infty$  et  $t \rightarrow -\infty$ . Ainsi on raccorde la sphère à l'infini à l'échelle quantique avec la sphère autour de  $r = 0$  à l'échelle macroscopique.

Pour la suite nous rappelons que la relation de commutation  $-1/2\Delta S = S(-1/2\Delta)$  permet d'écrire  $\hat{S} = \int_{(0,\infty)}^\oplus S(\lambda) d\lambda$ , avec  $S(\lambda) = Id - 2\pi i(2\lambda)^{\frac{d-2}{2}} T(\lambda)$ , où  $T(\lambda)$  est un opérateur (pseudo-différentiel) compact sur  $L^2(S^{d-1})$ . L'identité  $\psi_+ = \hat{S}\psi_-$  se traduit alors par

$$\psi_+(\xi) = \psi_-(\xi) - 2\pi i |\xi|^{d-2} \int_{S^{d-1}} T\left(\frac{|\xi|^2}{2}, \frac{\xi}{|\xi|}, \omega'\right) \psi_-(|\xi|\omega') d\omega'.$$

En dépit de la cohérence des résultats précédents, il reste donc une difficulté : le facteur  $|\psi_+(\cdot)|^2$  ne s'exprime pas en fonction de  $|\psi_-(\cdot)|^2$  et l'évolution limite est mal posée en terme de mesures semi-classiques. Ce problème disparaît asymptotiquement pour certaines familles d'états mélangés, c'est à dire d'opérateurs positifs de trace 1, dont la construction empruntée à W. Thirring [10] n'est pas dénuée de significations physiques. C'est le cas de la dimension  $d > 1$  qui est intéressant ici. On se donne  $\xi_0 \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}$ ,  $\Psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{0\})$  et  $\chi \in \mathcal{C}_0^\infty(\{\xi_0\}^\perp)$ , avec  $\chi \geq 0$ ,  $\int \chi = 1$  et  $\chi \equiv 1$  dans un voisinage de  $m = 0$ . On prend l'état  $P(\varepsilon, h)$  défini par l'intégrale de Bochner dans  $J_1$

$$P(\varepsilon, h) = \int_{\{\xi_0\}^\perp} \chi(m) P(m; \varepsilon, h) dm$$

où  $P(m; \varepsilon, h)$  est la projection orthogonale sur  $D_h W_- F^{-1} \left[ e^{-i\frac{m \cdot \xi}{\varepsilon}} \frac{1}{\varepsilon^{d/4}} \Psi\left(\frac{\xi - \xi_0}{\varepsilon^{1/2}}\right) \right]$ . L'évolution de cet état est donnée par

$$P(t; \varepsilon, h) = e^{-i\frac{t}{h} H^h} P(\varepsilon, h) e^{i\frac{t}{h} H^h} = \int_{\{\xi_0\}^\perp} \chi(m) e^{-i\frac{t}{h} H^h} P(m; \varepsilon, h) e^{i\frac{t}{h} H^h} dm$$

et le Theorème 2.1 s'applique aux états purs  $P(m; \varepsilon, h)$  pour certains  $T_+$  et  $T_-$  ne dépendant que de  $\Psi$ . La suite d'états  $(P(t; \varepsilon, h))_h$  admet alors une unique mesure semi-classique pour tout  $t \in (-T_-, 0) \cup (0, T_+)$ ,

$$(2.8) \mu(t, \varepsilon) = \begin{cases} \Phi_V(t)_* \left[ (2\pi)^{-d} \delta_{x=0} \frac{1}{\varepsilon^{d/2}} |\Psi\left(\frac{\xi - \xi_0}{\varepsilon^{1/2}}\right)|^2 \right], & \text{si } t \in (T_-, 0) \\ \Phi_V(t)_* \left[ \int_{\{\xi_0\}^\perp} \chi(m) \left[ (2\pi)^{-d} \delta_{x=0} |\psi_+(\xi; m, \varepsilon)|^2 \right] dm \right], & \text{si } t \in (0, T_+), \end{cases}$$

où l'on a posé  $\psi_+(m, \varepsilon) = \hat{S} \left[ e^{-i\frac{m \cdot \xi}{\varepsilon}} \frac{1}{\varepsilon^{d/4}} \Psi\left(\frac{\xi - \xi_0}{\varepsilon^{1/2}}\right) \right]$ . On renforce la condition de courte portée en supposant  $\mu > d > 1$  pour avoir la continuité de  $T(\lambda, \omega, \omega')$  par rapport à  $(\omega, \omega')$ . Un simple calcul conduit alors au

**Corollaire 2.4** Pour tout  $t \in (-T_-, 0) \cup (0, T_+)$ , la mesure semi-classique  $\mu(t, \varepsilon)$  vérifie

$$(2.9) \quad w^* - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mu(t, \varepsilon) = \Phi_V(t)_* [\delta_{x=0} \delta_{\xi=\xi_0}] = \delta_{\Phi_V(0, \xi_0; t)}.$$

Plus précisément, si  $\mathcal{T}_{\xi_0}$  désigne la trajectoire compacte  $\bigcup_{t \in [-T_-, T_+]} \Phi_V(0, \xi_0; t)$  dans  $T^*\mathbb{R}^d$  et si  $a \in \mathcal{C}_0(T^*\mathbb{R}^d)$  avec  $\text{supp } a \cap \mathcal{T}_{\xi_0} = \emptyset$ , on a alors

$$(2.10) \quad \int_{T^*\mathbb{R}^d} a d\mu(t, \varepsilon) = o_{a,t}(\varepsilon^\infty), \quad \forall t \in (-T_-, 0)$$

et

$$(2.11) \quad \int_{T^*\mathbb{R}^d} a d\mu(t, \varepsilon) = \varepsilon^{d-1} \int_{T^*\mathbb{R}^d} a d \left[ \Phi_V(t)_* \left[ \delta_{x=0} \frac{(2\pi)^{d+1}}{|\xi_0|} \left| T\left(\frac{|\xi_0|^2}{2}, \frac{\xi}{|\xi|}, \frac{\xi_0}{|\xi_0|}\right) \right|^2 \delta\left(\frac{|\xi|^2}{2} - \frac{|\xi_0|^2}{2}\right) \right] \right] + o_{a,t}(\varepsilon^{d-1}), \quad \forall t \in (0, T_+).$$

La limite (2.9) indique qu'au premier ordre il ne se passe rien. En effet, les phénomènes de diffusion sont marginaux comme cela est traduit par la compacité de la matrice  $T$  ou, en théorie stationnaire avec la décomposition de Sommerfeld des ondes diffusées, par la décroissance à l'infini des ondes sphériques. Les descriptions d'expériences de diffusion données dans [3][9] insistent d'ailleurs sur l'impossibilité de mesurer les sections efficaces sur la trajectoire du faisceau incident. Enfin, on déduit aisément de (2.11) la valeur  $(2\pi)^{d+1} |\xi|^{d-3} |T(\frac{|\xi|^2}{2}, \omega, \omega')|^2$  pour la section efficace de  $\omega \rightarrow \omega'$  à partir de sa définition générale en physique.

Toujours en travaillant avec des états mélangés bien choisis, on peut établir en dimension  $d = 1$  un lien avec l'équation de Boltzmann linéaire, aussi connu sous le nom de modèle de Lorentz, qui intervient dans la modélisation des semi-conducteurs.

**Proposition 2.5** Pour toute fonction  $g \in L^1(T^*\mathbb{R}) \cap \mathcal{C}^0(T^*\mathbb{R})$  satisfaisant

$$(2.12) \quad \Phi_V(t-s) \left[ \Phi_V(s) \text{supp } g \cap T_{x_i}^*\mathbb{R} \right] \cap \left( \bigcup_{j \in \mathbb{Z}} T_{x_j}^*\mathbb{R} \right) = \emptyset \\ \forall i \in \mathbb{Z}, \forall t, s \in [0, T], t > s,$$

on peut construire une suite d'opérateurs à trace  $(P^h)_{h \in (0, h_0)}$  telle que pour tout  $t \in [0, T]$  la suite  $(e^{-i\frac{t}{h}H^h} P^h e^{i\frac{t}{h}H^h})_{h \in (0, h_0)}$  admette pour unique mesure semi-classique  $f(t)$ , solution dans  $\mathcal{D}'(T^*\mathbb{R})$  de

$$(2.13) \quad \begin{cases} \partial_t f + \xi \cdot \partial_x f - \partial_x V \cdot \partial_\xi f = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta_{x_j}(x) \int_{\mathbb{R}} \left[ \sigma_j(\xi, \xi') f_j^-(\xi', t) \right. \\ \quad \left. - \sigma_j(\xi', \xi) f_j^-(\xi, t) \right] \delta\left(\frac{|\xi'|^2}{2} - \frac{|\xi|^2}{2}\right) d\xi' \\ f_{t=0} = g, \end{cases}$$

avec  $f_j^-(\xi, t) = \lim_{\substack{(x, \eta) \rightarrow (x_j, \xi) \\ (x-x_j) \eta < 0}} f(x, \eta; t)$  et  $\sigma_j(\xi', \xi) = 4\pi^2 |T_j(\xi', \xi)|^2$ .

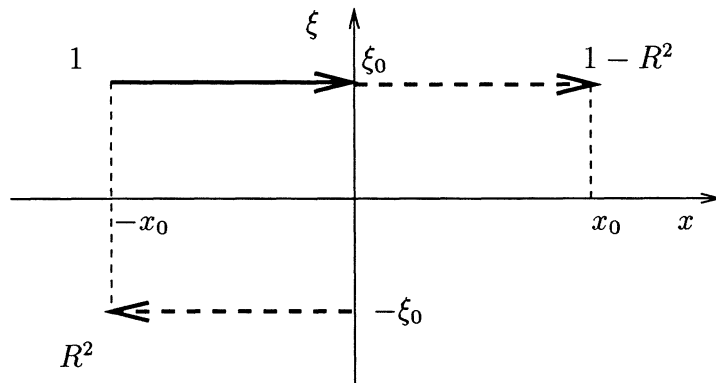


### 3 A propos de la donnée initiale

Rappelons que si  $\hat{S}(\lambda)$  est un pseudo sur la sphère, la matrice  $S$  n'est pas un opérateur pseudo-différentiel ni même micro-local. Ainsi connaissant "la" mesure de défaut en métrique  $\frac{dx^2}{(x)^2} + d\xi^2$  d'une suite  $u_t$  pour  $t \rightarrow \infty$  il n'est pas possible d'en déduire "la" mesure de  $Su_t$ . Le choix d'une donnée initiale se concentrant en  $x = 0$ ,  $u_0^h = D^h u_0$  avec  $u_0 = W_+ F^{-1} \psi_+ = W_- F^{-1} \psi_-$ , et la relation  $\psi_+ = \hat{S} \psi_-$  évacuent cette difficulté. Indépendamment de cet aspect technique, on peut se demander si l'impossibilité d'exprimer la mesure sortante en fonction de la mesure entrante n'est pas liée à l'échelle d'oscillations choisie pour la donnée initiale. On pourrait par exemple considérer des fonctions d'onde de la forme  $h^{-d/4} e^{i\frac{(x-x_0)\xi_0}{h}} \psi(\frac{x-x_0}{h^{1/2}})$ , permettant de concentrer simultanément en positions et fréquences. Il n'est pas exclu que l'on obtienne de cette manière des résultats plus précis. Néanmoins l'argument a priori qui suit (ce n'est pas une démonstration) montre que l'aspect non déterministe de l'évolution asymptotique demeure dans tous les cas. De ce point de vue, le cadre semi-classique de l'espace des phases est inadapté à la description des phénomènes de diffusion de nature purement quantique.

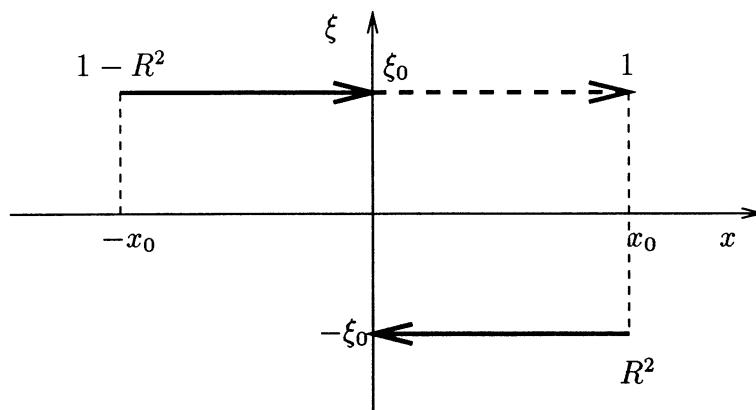
Nous nous plaçons en dimension  $d = 1$  dans le cas où  $V = 0$ ,  $U_j = 0$  pour  $j \neq 0$  et où  $U(-x) = U(x)$ . Nous supposons que l'asymptotique pour  $h \rightarrow 0$  de l'équation (1.1) avec des données initiales générales conserve deux propriétés vérifiées dans notre cas : a) Pour certains états initiaux bien choisis la mesure semi-classique après collision se compose d'une partie transmise et d'une partie réfléchie. C'est ce que l'on obtient par exemple en écrivant explicitement la solution de (2.13) avec les coefficients de réflexions  $R(\xi) = -\frac{2\pi i}{|\xi|} T(-\xi, \xi)$ . b) Principe de superposition : le passage à la limite, quand on travaille avec les états (on oublie la normalisation à 1) plutôt qu'avec les fonctions d'onde, est linéaire.

Supposons donc donné un état  $P(t, h) = e^{-i(t+T)H^h} P(-T, h) e^{i(t+T)H^h}$  admettant pour tout  $t \in [-T, 0) \cup (0, T]$  une unique mesure semi-classique  $\mu(t)$  vérifiant  $\mu(-T) = \delta_{-x_0, \xi_0}$  (pour simplifier) et  $\mu(T)(1 - R^2)\delta_{x_0, \xi_0} + R^2\delta_{-x_0, -\xi_0}$  avec  $R = |R(\xi_0)| = |R(-\xi_0)|$ .



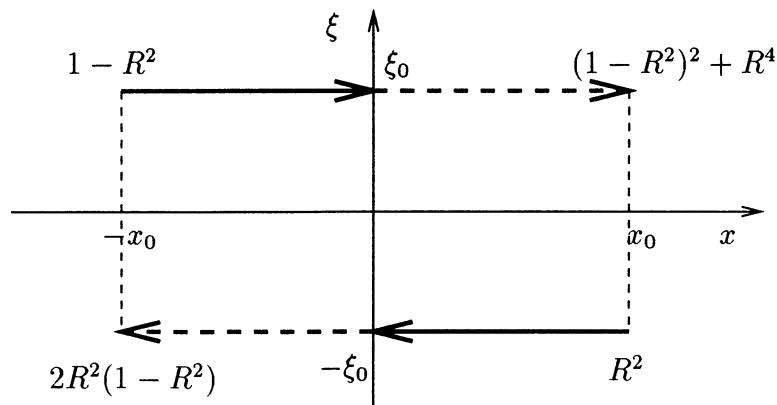
Evolution de la mesure semi-classique  $\mu(t)$

On considère alors l'état  $P'(t, h)$  déduit de  $P(t, h)$  en changeant  $t$  en  $-t$  et  $x$  en  $-x$ . Puisque l'on a supposé  $U(-x) = U(x)$ , cet état satisfait encore  $P'(t, h) = e^{-i(t+T)H^h} P'(-T, h) e^{i(t+T)H^h}$ . Dans le même temps, sa mesure semi-classique  $\mu'(t)$  évolue de  $(1 - R^2)\delta_{-x_0, \xi_0} + R^2\delta_{x_0, -\xi_0}$  à  $\delta_{x_0, \xi_0}$  selon la figure



Evolution de la mesure semi-classique  $\mu'(t)$

Prenons maintenant  $P''(t, h) = P_1(t, h) + P_2(t, h)$  où les états  $P_1(t, h)$  et  $P_2(t, h)$  sont construits comme  $P(t, h)$  avec pour mesures semi-classiques respectives en  $t = -T$ ,  $\mu_1(-T) = (1 - R^2)\delta_{-x_0, \xi_0}$  et  $\mu_2(-T) = R^2\delta_{x_0, -\xi_0}$ . Par linéarité, on obtient une mesure semi-classique  $\mu''(t)$  telle que  $\mu''(-T) = \mu'(-T)$  et  $\mu''(T) \neq \mu'(T)$ . En effet on a d'une part  $\mu''(-T) = (1 - R^2)\delta_{-x_0, \xi_0} + R^2\delta_{x_0, -\xi_0}$  et d'autre part  $\mu''(T) = [(1 - R^2)^2 + R^4]\delta_{x_0, \xi_0} + 2R^2(1 - R^2)\delta_{-x_0, -\xi_0}$ .



Evolution de la mesure semi-classique  $\mu''(t)$  :  
 $\mu''(-T) = \mu'(-T)$  et  $\mu''(T) \neq \mu'(T)$ .

En fait les problèmes apparaissent quand l'onde diffusée est à nouveau focalisée sur un obstacle. Cette situation n'est pas toujours exceptionnelle, c'est la règle par exemple quand le potentiel à l'échelle macroscopique est celui de l'oscillateur harmonique,  $V(x) = x^2$ .

## References

- [1] J.M. Bony. Opérateurs intégraux de Fourier et calcul de Weyl-Hörmander (Cas d'une métrique symplectique). *Journées EDP-Saint-Jean-de-Monts*, pages IX-1-IX-14, 1994.
- [2] J.M. Bony and N. Lerner. Quantification asymptotique et microlocalisation d'ordre supérieur I. *Ann. Scient. Ec. Norm. Sup., 4<sup>e</sup> série*, 22:377-433, 1989.
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique Quantique*. Hermann, 1973.
- [4] J. Dereziński and C. Gérard. *Asymptotic Completeness of N-Particles Systems*. Springer Verlag, to appear.
- [5] C. Fermanian-Kammerer. *Equation de la chaleur et mesures semi-classiques*. Thèse, Univ. Paris XI, 1994.
- [6] P. Gérard. Mesures semi-classiques et ondes de Bloch. *Seminaire EDPX 1990-1991*, (16).
- [7] B. Helffer, Martinez A., and D. Robert. Ergodicité et limite semi-classique. *Commun. in Math. Phys.*, 109:313-326, 1987.
- [8] P.L. Lions and T. Paul. Sur les mesures de Wigner. *Rev. Mat. Iberoamericana*, 9(3):553-618, 1993.
- [9] A. Messiah. *Mécanique Quantique*. Dunod, 1965.
- [10] W. Thirring. *Quantum Mechanics of Atoms and Molecules*, volume 3 of *A Course in Mathematical Physics*. Springer-Verlag, 1979.

Centre de Mathématiques  
Ecole Polytechnique

91128 Palaiseau cedex