

SÉMINAIRE JEAN LERAY. SUR LES ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

JEAN LERAY

Solutions asymptotiques de l'équation de Dirac

Séminaire Jean Leray, n° 2 (1974-1975), p. 1-19

http://www.numdam.org/item?id=SJL_1974-1975__2_1_0

© Séminaire Jean Leray (Collège de France, Paris), 1974-1975, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la collection « Séminaire Jean Leray » 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/>

SOLUTIONS ASYMPTOTIQUES DE L'EQUATION DE DIRAC^(*)

par Jean LERAY

Dans des Colloques antérieurs [1] nous avons explicité la notion de solution asymptotique d'équations aux dérivées partielles, due à V.I. Maslov [2] ; nous l'avons étendue à des équations pseudo-différentielles formelles et rattachée à la notion de solution lagrangienne ; le § 1 rappelle les propriétés essentielles de ces notions, sans rappeler le détail de leur définition, qu'expose [1]. Le § 2 complète l'étude, amorcée dans [1], des solutions asymptotiques à supports compacts des équations de Schrödinger et Klein-Gordon, et l'étend à l'équation de Dirac.

§ 1. LA NOTION DE SOLUTION ASYMPTOTIQUE

1. - SOMMAIRE. - Soit Z l'espace \mathbb{R}^{2k} muni d'une structure symplectique $[\cdot, \cdot]$, c'est-à-dire d'une forme bilinéaire, antisymétrique, à valeurs réelles, de rang maximal. Soit

$$v \in i \dot{\mathbb{R}}_+ ,$$

$\dot{\mathbb{R}}_+$ étant l'ensemble des nombres réels > 0 .

Nous définissons, comme le précise le n° 3, un opérateur pseudo-différentiel a par la donnée sur Z d'une fonction v -formelle a^0 , à valeurs matricielles :

$$(1.1) \quad a^0(v, z) = \sum_{j \in \mathbb{N}} v^{-j} a_j^0(z) ,$$

cette somme étant formelle et ayant pour coefficients des fonctions C^∞

$$a_j^0 : Z \rightarrow C^{k \times k} .$$

L'opérateur a est self-adjoint si la matrice $v^{-j} a_j^0(z) \in C^{k \times k}$ est self-adjointe pour tout j et tout z .

Ces opérateurs opèrent sur les fonctions lagrangiennes U , dont le n° 5 résume la définition ; une telle fonction lagrangienne est définie, dans un repère R (n°4) par une v -série formelle U_R , dont les coefficients sont des fonctions C^∞ , à valeurs vectorielles :

(*) A paraître : Symposium on trends of applications of pure mathematics to mechanics, Lecce, 1975.

$$V \rightarrow \mathbb{C}^k,$$

V étant une variété lagrangienne de Z. c'est-à-dire une variété sur laquelle

$$(1.2) \quad d[z, dz] = 0,$$

ce qui implique $\dim V \leq \ell$; nous choisissons $\dim V = \ell$.

Une solution lagrangienne de l'équation

$$(1.3) \quad a U = 0$$

est une fonction lagrangienne vérifiant cette équation.

Toute solution lagrangienne U de a définit dans chaque repère R une solution asymptotique U_R de l'expression a_R de a dans R (voir n° 3), et vice-versa. L'emploi de la notion de solution lagrangienne montre que les singularités des solutions asymptotiques ne sont qu'apparentes. (L'optique géométrique consiste à employer des solutions asymptotiques des équations de Maxwell ; elles ont des singularités sur les caustiques, c'est-à-dire sur l'enveloppe des rayons lumineux).

La construction des solutions lagrangiennes U d'un opérateur a s'effectue par le processus suivant quand la matrice a_0^0 est self-adjointe et que

$$H(z) = \det a_0^0(z)$$

n'est pas identiquement nul ; la fonction, à valeurs réelles, H, est alors nommée hamiltonien de l'opérateur a.

1) On construit les variétés lagrangiennes V appartenant à l'hypersurface $W : H(z) = 0$; cette construction équivaut à celle des solutions d'une équation aux dérivées partielles, non linéaire, du premier ordre : les équations de V s'obtiennent en annulant H et $\ell-1$ autres intégrales premières du système d'Hamilton :

$$(1.4) \quad \frac{dz}{dt} = H_z(z),$$

où H_z est le champ de vecteurs de Z tel que

$$dH = [H_z, dz] ;$$

les courbes de Z vérifiant ce système d'Hamilton sont nommées caractéristiques de Maslov ou m-caractéristiques ; V est engendré par une famille de m-caractéristiques.

2) Sur le revêtement universel \check{V} de V, on construit la fonction

$$\varphi : \check{V} \rightarrow \mathbb{R}$$

telle que

$$(1.5) \quad d\varphi = \frac{1}{2} [z, dz] ;$$

on la norme phase de V.

3) On détermine U par intégration, le long des m - caractéristiques engendrant V , d'une suite de systèmes différentiels linéaires.

4) Ce processus n'aboutit à la construction de U que si une suite de conditions d'uniformité sur V se trouve vérifiée ; dans ces conditions figure l'indice de Maslov [2] : ce sont les conditions quantiques de Maslov.

Note 1.1. - Si l'on définit $U \bmod \frac{1}{\sqrt{N}}$, c'est-à-dire si on limite le processus précédent à ses N premiers pas (une condition banale étant imposée à $U \bmod \frac{1}{\sqrt{N+1}}$ si $k > 1$), alors

$$(1.6) \quad a U \equiv 0 \bmod \frac{1}{\sqrt{N+1}} ;$$

on dit que U est solution d'ordre N .

Note 1.2. - Supposons

$$H_z \neq 0 \text{ pour } H = 0.$$

Soit V une variété lagrangienne appartenant à l'hypersurface $W : H(z) = 0$; pour qu'existe sur V au moins une solution lagrangienne U d'ordre 1, il faut et suffit que les conditions suivantes soient vérifiées :

- 1) V possède au moins une mesure régulière, invariante par le champ de vecteurs H_z , qui est tangent à V ;
- 2) la condition de Maslov d'ordre 1, qui ne concerne que V , est vérifiée.

L'intégration à effectuer, le long des m - caractéristiques engendrant V , pour obtenir $U \bmod \frac{1}{\sqrt{N}}$ est banale.

L'étude des solutions lagrangiennes d'une équation aux dérivées partielles diffère donc essentiellement de celle des solutions de cette équation au sens de l'analyse fonctionnelle : cette étude emploie la géométrie symplectique, les propriétés des équations d'Hamilton, l'invariant topologique appelé indice de Maslov et son expression par des procédés de géométrie différentielle, les conditions quantiques de Maslov. Ces notions étaient celles qu'employait la première mécanique quantique, à cela près que les conditions quantiques de Maslov ont une définition générale, qu'impose la notion de solution lagrangienne, tandis que la première théorie quantique emploie des conditions quantiques, de nature arithmétique, qui n'ont de sens que dans des cas particuliers.

2. LES REPERES DE Z . - Notons $X = \mathbb{R}^\ell$, X^* son dual, $Z(\ell)$ l'espace $X \oplus X^*$ muni de la structure symplectique $[\cdot, \cdot]$ définie comme suit :

$$(2.1) \quad [z, w] = \langle p, y \rangle - \langle q, x \rangle$$

où :

$$z = p + x, w = q + y, x \text{ et } y \in X, p \text{ et } q \in X^* ;$$

$Sp(\ell)$ désigne le groupe des automorphismes de $Z(\ell)$, c'est-à-dire le groupe symplectique réel.

Un repère de Z est un isomorphisme $R : Z \rightarrow Z(\ell)$ respectant la structure symplectique. Etant donnés deux tels repères, R et R' , nous nommons changement de repère l'élément.

$$s_R^{R'} = R R'^{-1} \text{ de } Sp(\ell).$$

3. OPERATEURS PSEUDO-DIFFERENTIELS . - Etant donné la série formelle (1.1)

$a^0 = \sum_j v^{-j} a_j^0$, indiquons comment s'en déduit l'opérateur pseudo-différentiel a , quand

les a_j^0 sont des polynômes en z ; (la définition de a quand les a_j^0 sont des fonctions en résulte par complétion) :

Soit R un repère de Z ; notons a_R^0 la fonction v -formelle, à valeurs matricielles, définie sur $Z(\ell)$ par

$$(3.1) \quad a_R^0(v, x, p) = a^0(v, R^{-1}(x + p)) ;$$

notons

$$(3.2) \quad e^{\frac{1}{2v} \langle \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial p} \rangle} a_R^0(v, x, p) = a_R^+(v, x, p) = \sum_{\alpha} a_{R, \alpha}^+(v, x) p^{\alpha}$$

$$(3.3) \quad e^{-\frac{1}{2v} \langle \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial p} \rangle} a_R^0(v, x, p) = a_R^-(v, p, x) = \sum_{\alpha} a_{R, \alpha}^-(v, x) p^{\alpha} ;$$

soit a_R l'opérateur différentiel tel que :

$$(3.4) \quad a_R f(x) = a_R^+(v, x, \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x}) f(x) = \sum_{\alpha} a_{R, \alpha}^+(v, x) (\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x})^{\alpha} f(x)$$

$$= a_R^- \left(v, \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x}, x \right) f(x) = \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x} \right)^{\alpha} [a_{R\alpha}^- (v, x) f(x)].$$

L'opérateur pseudo-différentiel a est, par définition, l'ensemble des opérateurs a_R ; a_R est appelé expression de a dans le repère R .

4. LES REPERES DE Z_q . - Nous emploierons les variétés lagrangiennes de Z et, en particulier, les plans lagrangiens λ de Z : λ est un sous-espace, de dimension ℓ , isotrope, c'est-à-dire tel que

$$(4.1) \quad [z, w] = 0 \text{ quand } z \text{ et } w \in \lambda.$$

l'ensemble $\Lambda(Z)$ des plans lagrangiens de Z est nommé grassmannienne lagrangienne de Z ; $\Lambda(Z(\lambda))$ est noté $\Lambda(\lambda)$.

V.I. Arnold [2] a déterminé le premier groupe d'homotopie de $\Lambda(Z)$.

$$(4.2) \quad \pi_1 [\Lambda(Z)] \simeq \mathbb{Z} ;$$

$\Lambda(Z)$ possède donc un seul revêtement, $\Lambda_q(Z)$, à q feuillets. Il est bien connu que

$$(4.3) \quad \pi_1 [Sp(\ell)] \simeq \mathbb{Z} ;$$

$Sp(\ell)$ possède donc un seul revêtement, $Sp_q(\ell)$, à q feuillets ; $Sp_q(\ell)$ est un groupe, qui opère sur $\Lambda_{2q}(Z)$.

Munir $\lambda \in \Lambda(Z)$ d'une q -orientation, c'est choisir $\lambda_q \in \Lambda_q(Z)$, de projection naturelle λ sur $\Lambda(Z)$.

Notons Z_q la donnée de Z et de $q \in \{1, 2, \dots, \infty\}$; convenons que dans Z_q les seules orientations utilisées des plans lagrangiens, donc des variétés lagrangiennes seront des $2q$ -orientations.

Un repère R de Z_q sera constitué par :

- un isomorphisme $Z \rightarrow Z(\ell)$ respectant la structure symplectique ;
 - un homéomorphisme $\Lambda_{2q}(Z) \rightarrow \Lambda_{2q}(\ell)$ ayant pour projection naturelle $\Lambda(Z) \rightarrow \Lambda(\ell)$
- l'homéomorphisme induit par cet isomorphisme.

On constate qu'un changement de repère est caractérisé par un élément $S_R^{R'}$ de $Sp_q(\ell)$.

Note 4.1. - Tout repère de Z_q définit un repère de Z ; tout changement de repère de Z_q , $S_R^{R'}$, définit un changement de repère ,

$s_{\mathbb{R}}^{\mathbb{R}'}$, de \mathbb{Z} ; $S_{\mathbb{R}}^{\mathbb{R}'} \rightarrow s_{\mathbb{R}}^{\mathbb{R}'}$ est la projection naturelle de $Sp_q(\ell)$ sur $Sp(\ell)$.

Note 4.2. - Nous choisirons $q = 2$, parce que nous emploierons les propriétés suivantes.

5. LES PROPRIETES DE $Sp_2(\ell)$. - Soit $\mathcal{F}(X)$ l'espace de L. Schwartz des fonctions $X = \mathbb{R}^{\ell} \rightarrow \mathbb{C}^{\mathbb{N}}$ dont toutes les dérivées existent et sont à décroissance rapide. Soit $G(\ell)$ le groupe des automorphismes S de $\mathcal{F}(X)$ qui transforment un opérateur différentiel a_X , linéaire en x et $\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x}$, en un opérateur $S^{-1} a_X S = s a_X$ du même type ; on constate que $s \in Sp(\ell)$ et que $S \rightarrow s$ définit un épimorphisme $G(\ell) \rightarrow Sp(\ell)$ de noyau $\dot{\mathbb{C}}$ (groupe des multiplications des éléments de $\mathcal{F}(X)$ par des constantes complexes non nulles) :

$$(5.1) \quad G(\ell) / \dot{\mathbb{C}} = Sp(\ell).$$

$G(\ell)$ opère sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}(X)$ et sur l'espace des distributions tempérées $\mathcal{F}'(X)$.

On nomme groupe métaplectique l'ensemble $Mp(\ell)$ des éléments de $G(\ell)$ qui sont unitaires, c'est-à-dire qui conservent la norme de $\mathcal{H}(X)$; on a :

$$(5.2) \quad G(\ell) = Mp(\ell) \times \dot{\mathbb{R}}_+ \quad (\mathbb{R}_+ : \text{axe réel } > 0 \text{ de } \mathbb{C}) ;$$

$$(5.3) \quad Mp(\ell) / s_1 = Sp(\ell) \quad (s_1 : \text{cercle trigonométrique de } \mathbb{C}).$$

$Mp(\ell)$ contient un sous-groupe qui s'identifie à $Sp_2(\ell)$:

$$(5.4) \quad Sp_2(\ell) / s_0 = Sp(\ell) \quad (s_0 = \{1, -1\}).$$

$G(\ell)$ est engendré par :

- les éléments de $\dot{\mathbb{C}}$;
- la composition des fonctions ou distributions avec les automorphismes de X ;
- les transformées de Fourier en $1, 2, \dots, \ell$ variables ;
- la multiplication par les fonctions e^{iq} , q étant une forme quadratique $X \rightarrow \mathbb{R}$.

Donnons l'expression des deux éléments $\pm S$ de $Sp_2(\ell)$, ayant pour image $s \in Sp(\ell)$, s quand s est générique. Il existe alors une forme quadratique

$$A \text{ de } (x, x') \in X \oplus X,$$

telle que :

$$\det \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x \partial x'} \right) \neq 0 ;$$

$(x, p) = s(x', p')$ équivaut à

$$(5.5) \quad p = \frac{\partial A(x, x')}{\partial x}, \quad p' = - \frac{\partial A(x, x')}{\partial x'} .$$

Alors, pour tout $f \in \mathcal{F}(X)$,

$$(5.6) \quad (Sf)(x) = \left(\frac{|v|}{2\pi i} \right)^{1/2} \sqrt{\det \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x \partial x'} \right)} \int_X e^{v A(x, x')} f(x') d^l x' ;$$

Si f dépend de v et a un développement asymptotique du type

$$(5.7) \quad v(v, x') = \alpha(v, x') e^{v \psi(x')}$$

où $\psi : X \rightarrow \mathbb{R}$ est nommée phase

et $\alpha(v, x') = \sum_{j \in \mathbb{N}} v^{-j} \alpha_j(x')$ amplitude ($\alpha_j \in C_0^\infty$).

alors Sf possède un développement asymptotique Sv du même type : on le prouve par la "méthode de la phase stationnaire," en supposant un instant que v tend $i\infty$.

Il en résulte que tout $S \in Sp_2(\ell)$ opère localement sur les fonctions formelles du type (5.7) ; S ne conserve ni le support, ni le support singulier.

7. FONCTION LAGRANGIENNE . - Dans Z_2 , soit V une variété lagrangienne de phase φ .

Soit R' un repère de Z_2 :

$$(7.1) \quad R'(z) = x' + p', \quad \text{où } x' \in X ; p' \in X^* ;$$

nous employons x' comme coordonnée locale de V quand c'est possible ; c'est hors d'une partie $\sum_{R'}$ de V ; $\sum_{R'}$ est nommé contour apparent de V pour le repère

R' ; $\sum_{R'}$ est, en général, une hypersurface de V . Considérons les fonctions

v -formelles $U_{R'}$, définies localement, sur $V \setminus \sum_{R'}$, par une expression du type (5.7),

de phase

$$(7.2) \quad \varphi_{R'}(z) = \varphi(z) + \frac{1}{2} \langle p', x' \rangle, \quad \text{où } z \in V,$$

en sorte que

$$(7.3) \quad d \varphi_R = \langle p', dx' \rangle,$$

Alors $S_R^{R'}$ transforme U_R , en une expression du même type, $U_R = S_R^{R'} U_{R'}$, définie sur

$V \setminus \sum_R \cup \sum_{R'}$ et de phase

$$\varphi_R(z) = \varphi(z) + \frac{1}{2} \langle p, x \rangle \quad \text{où} \quad R(z) = x + p.$$

Une fonction lagrangienne $U = \{U_R\}$ est, par définition, la donnée, pour chaque repère R de V , sur $V \setminus \sum_R$, d'une telle fonction v-formelle U_R , la condition de compatibilité

$$(7.4) \quad U_R = S_R^{R'} U_{R'}$$

étant vérifiée pour tout R et tout R' ; U_R est appelé expression de U dans le repère R . U possède un support, appartenant V , tel que :

$$\text{supp}_R(U) = \text{supp}(U) \cap (V \setminus \sum_R)$$

La relation (7.4) permet de décrire la singularité de U_R sur \sum_R ; l'emploi de l'indice de Maslov est nécessaire.

Soit a un opérateur pseudo-différentiel, d'expression a_R dans le repère de Z image du repère R de Z_2 (n°3; Note 4.1); si $U = \{U_R\}$, alors $\{a_R U_R\}$ définit une fonction lagrangienne, qui sera notée $a U$:

$$(7.5) \quad (a U)_R = a_R U_R.$$

La résolution d'une équation lagrangienne

$$(7.6) \quad a U = 0$$

peut, en tenant compte de la nature des singularités de U_R sur \sum_R , employer un seul repère; le n° 1 a décrit le processus de cette résolution.

Bien entendu, la théorie précédente, (en particulier la notion d'opérateur pseudo-différentiel, que V.I. Maslov n'emploie pas) est indispensable à la justification de ce processus : l'équation

$$a_R U_R = 0$$

est vérifiée même sur \sum_R , où U_R a une singularité, en le sens suivant :

$$a_{R'} U_{R'} = 0 \quad \text{sur} \quad \sum_R \setminus \sum_R \cap \sum_{R'},$$

où $U_{R'}$ est régulier.

Note . - Dans les applications qu'expose le §2, il est essentiel que ν ait une valeur fixe ; ce sera

$$\nu = i \quad (\text{ou } \nu = \frac{i}{h}, \quad h : \text{constante de Planck}).$$

Quand ν est fixé, une fonction ν -formelle n'est plus définie par une somme formelle

$$\sum_{j \in \mathbb{N}} \nu^{-j} \alpha_j e^{\nu \varphi}; \quad \underline{\text{elle est définie par l'ensemble } \{ \nu^{-j} \cdot \alpha_j e^{\nu \varphi} \} \text{ des termes de}}$$

cette somme, les lois du calcul des séries formelles en ν étant conservées.

§ 2. LES SOLUTIONS ASYMPTOTIQUES A SUPPORT COMPACT DES EQUATIONS
DE LA MECANIQUE ONDULATOIRE.

Les solutions des équations de Schrödinger, Klein - Gordon, Dirac ne sont pas, en physique, des grandeurs observables : du point de vue physique, il n'est pas absurde de chercher pour quelles valeurs de leur paramètre, l'énergie, elles possèdent des solutions lagrangiennes, définies sur des variétés lagrangiennes compactes ; on retrouve les niveaux d'énergie de la mécanique ondulatoire, c'est-à-dire les niveaux d'énergie pour lesquels ces équations possèdent des solutions (au sens de l'analyse fonctionnelle) à gradients de carrés sommables.

La notion de solution lagrangienne permet donc un nouvel emploi de ces équations, s'accordant avec les résultats expérimentaux et s'apparentant étroitement avec la mécanique corpusculaire (cf. n° 1).

Ces équations ont pour hamiltonien celui de l'électron de l'atome d'hydrogène, placé dans un champ magnétique uniforme, de carré négligeable.

Notations. - E^3 est l'espace euclidien de dimension 3 ; $X = X^* = E^3$; un repère privilégié de Z est choisi, identifiant Z à $X \oplus X^*$; un vecteur z de Z est donc un couple (x, p) de vecteurs de E^3 ; on note

$$R = |x|, \quad P = |p|, \quad L = |x \wedge p|, \quad Q = \langle p, x \rangle, \quad M = x_1 p_2 - x_2 p_1,$$

en sorte que

$$P^2 R^2 = L^2 + Q^2, \quad |M| \leq L.$$

Notons φ, ψ, θ les angles d'Euler du repère orthonormé de E^3 dont les premier et troisième axes contiennent x et $x \wedge p$; on a donc : $M = L \cos \theta$.

Nous choisissons :

$$v = i$$

8. UNE EQUATION DU TYPE SCHRÖDINGER, KLEIN - GORDON. - Il s'agit de l'équation

$$(8.1) \quad a U = 0,$$

où l'opérateur a est défini par $a^0 = H$, indépendant de v , et

$$(8.2) \quad H(x, p) = H[L, M, Q, R].$$

Nous cherchons à quelle condition cette équation (8.1) possède des solutions lagrangiennes U , d'ordre 1, à support compact. C'est chercher à quelle condition l'hyper-surface de Z

$$(8.3) \quad W : H [L, M, Q, R] = 0$$

contient au moins une variété lagrangienne, à support compact, vérifiant les conditions quantiques de Maslov.

Nous imposons à (L, M) les deux conditions :

$$|M| \leq L ;$$

la courbe du demi-plan $(Q, R > 0)$

$$(8.4) \quad \Gamma (L, M) : H [L, M, Q, R] = 0,$$

est compacte et n'a pas de singularité.

Sur cette courbe définissons un paramètre t par :

$$(8.5) \quad \frac{dR}{R H_Q} = - \frac{dQ}{R H_R} = dt ; \quad \text{soit } c = \int_{\Gamma} dt ;$$

sur W nous employons les coordonnées

$L, M, t \bmod c, \varphi \bmod 2\pi, \psi \bmod 2\pi$

et les fonctions $\omega, \lambda, \mu, \rho, \sigma, \tau$ de (L, M, T) , à valeurs réelles, définies par les équations :

$$(8.6) \quad \begin{aligned} d\omega &= Q \frac{dR}{R} + \lambda dL + \mu dM \\ d\lambda &= -H_L dt + \rho dL + \sigma dM \\ d\mu &= -H_M dt + \sigma dL + \tau dM. \end{aligned}$$

Notons : $\Delta\omega = \omega(L, M, t + c) - \omega(L, M, t)$, etc ; nous avons, en définissant

$$(8.7) \quad N(L, M) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma(L, M)} Q \frac{dR}{R},$$

$$(8.8) \quad \Delta\omega = 2\pi N(L, M), \Delta\lambda = 2\pi N_L, \Delta\mu = 2\pi N_M, \Delta\rho = 2\pi N_{L^2}, \Delta\sigma = 2\pi N_{LM}, \Delta\tau = 2\pi N_M^2.$$

La valeur des dérivées $\rho_t(L, M, t), \sigma_t, \tau_t$ est donnée par la condition :

$$(8.9) \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho_t \dot{L}^2 + 2 \sigma_t \dot{L} \dot{M} + \tau_t \dot{M}^2 + \\ + H_{L^2} \dot{L}^2 + H_{M^2} \dot{M}^2 + H_{Q^2} \dot{Q}^2 + 2 H_{MQ} \dot{M} \dot{Q} + 2 H_{LQ} \dot{L} \dot{Q} + 2 H_{LM} \dot{L} \dot{M} = 0 \\ \text{pour tout } (\dot{L}, \dot{M}, \dot{Q}) \text{ tel que } H_L \dot{L} + H_M \dot{M} + H_Q \dot{Q} = 0 . \end{array} \right.$$

D'une part les m -caractéristiques sont les courbes :

$$(8.10) \quad C : L = \text{const}, M = \text{const}, \psi + \lambda(L, M, t) = \text{const}, \phi + \mu(L, M, t) = \text{const}$$

D'autre part, à la traversée du contour apparent de V , le long d'une m -caractéristique orientée dans le sens $dt > 0$, le saut ± 1 de l'indice de Maslov est le signe de

$$(8.11) \quad \rho_t \dot{L}^2 + 2 \sigma_t \dot{L} \dot{M} + \tau_t \dot{M}^2 - H_L \frac{(L \dot{M} - \dot{L} M)^2}{(L^2 - M^2) \sin^2 \psi} .$$

Ces formules permettent d'établir les résultats suivants, dont le 1er est aisé et n'emploie pas ρ, σ, τ :

Il existe trois types V_1, V_2, V_3 de variétés lagrangiennes compactes V , appartenant à W :

1) Une variété V_3 est un tore de dimension 3 :

$$T^3(L, M) : L = \text{const} ; M \neq \text{const} ;$$

elle vérifie la condition quantique de Maslov ($n^\circ 1$) quand :

$$(8.12) \quad L + \frac{1}{2} \equiv 0, M \equiv 0, N(L, M) + \frac{1}{2} \equiv 0 \pmod{1} ; |M| \leq L .$$

2) Sur une variété V_2 , L et M ne sont pas constants, mais sont fonction d'un même paramètre s ; V_2 est fibré par des tores $T^2(s)$ de dimension 2 ; toute caractéristique engendrant V_2 appartient à l'un de ces tores ; il en résulte que

N_L et N_M sont liés par une relation affine à coefficients entiers ; ces entiers sont constants sur V_2 . L'emploi de (8.9) et (8.10) permet d'explicitier sur V_2 une fonction F à valeurs réelles telle que :

- le contour apparent ait l'équation : $F \equiv 0 \pmod{1}$;
- l'indice de Maslov soit la partie entière de F .

La condition quantique de Maslov est vérifiée quand existent 6 entiers

$$L_0, M_0, N_0, L_1, M_1, N_1 \text{ tels que :}$$

$$(8.13) \quad \left\{ \begin{array}{l} L_0 L_1 + M_0 M_1 + N_0 N_1 = 0 ; \\ L_1, M_1, N_1 \text{ sont premiers dans leur ensemble ;} \\ \text{sur } V_2 : (L_1, M_1, N_1) \wedge (L + \frac{1}{2}, M, N(L, M) + \frac{1}{2}) = (L_0, M_0, N_0) \end{array} \right.$$

3) Une variété V_1 contient une partie ouverte V_0 sur laquelle L et M sont indépendants ; V_0 est fibrée par des m -caractéristiques fermées ; il en résulte que N_L et N_M sont rationnels et constants sur V_0 . L'emploi de (8.9) et (8.10) permet d'explicitier sur V_0 une fonction F ayant les propriétés énoncées ci-dessus en 2). La condition quantique de Maslov est vérifiée quand existent 4 entiers L_1, M_1, N_1, N_0 tels que :

$$(8.14) \quad \left\{ \begin{array}{l} L_1, M_1, N_1 \text{ sont premiers dans leur ensemble ;} \\ \text{sur } V_0 : L_1 (L + \frac{1}{2}) + M_1 M + N_1 N(L, M) = N_0 . \end{array} \right.$$

D'où :

THEOREME 8. - L'équation (8.1) ne peut posséder de solution lagrangienne d'ordre 1 à support compact que si, dans l'espace de coordonnées (L, M, N) la surface d'équation [cf.(8.7)]

$$(8.15) \quad N = N(L, M) , \quad |M| \leq L$$

vérifie l'une des trois conditions suivantes :

1) La surface (8.15) contient un point (L, M, N) tel que :

$$(8.16) \quad L - \frac{1}{2} \equiv M \equiv N + \frac{1}{2} \equiv 0 \pmod{1}$$

2) Cette surface (8.15) contient un segment rectiligne d'équation.

$$(8.17) \quad (L_1, M_1, N_1) \wedge (L + \frac{1}{2}, M, N + \frac{1}{2}) = (L_0, M_0, N_0) ,$$

où $L_0, M_0, N_0, L_1, M_1, N_1$ sont entiers (c'est-à-dire $\in \mathbb{Z}$), L_1, M_1, N_1 étant premiers entre eux dans leur ensemble .

3) Cette surface (8.15) contient une partie ouverte d'un plan d'équation

$$(8.18) \quad L_1 (L + \frac{1}{2}) + M_1 M + N_1 (N + \frac{1}{2}) = N_0 ,$$

où L_1, M_1, N_1, N_0 sont entiers (c'est-à-dire $\in \mathbb{Z}$), L_1, M_1, N_1 étant premiers dans leur ensemble.

Quand la surface (8.15) vérifie 1), alors l'équation (8.1) possède des solutions lagrangiennes définies sur le tore $T^3(L, M)$.

9. LES EQUATIONS DE SCHRÖDINGER ET DE KLEIN - GORDON . - Ces équations s'obtiennent en choisissant

$$(9.1) \quad H(x, p) = \frac{1}{2} P^2 + \frac{1}{2} A(M) - \frac{B}{R} + \frac{C}{2R^2},$$

où A est fonction affine de M, B et C sont constants,

$$a^0 = H; \text{ or } \left\langle \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial p} \right\rangle H = 0; \text{ donc, vu (3.2) et (3.3) :}$$

$$a^{\pm} = H.$$

C = 0 dans le cas Schrödinger ; C < 0 dans le cas Klein - Gordon (c'est-à-dire Schrödinger relativiste).

L'intégrale (8.7) se calcule aisément par résidus ; de ce calcul résulte ceci : les cas 2) et 3) du théorème 8 ne se présentent qu'en même temps que le cas 1) ; ce cas est celui où existent trois entiers

$$l = L - \frac{1}{2}, m, n = L + N$$

tels que

$$(9.2) \quad n = \frac{B}{\sqrt{A(m)}} + l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + C}, \quad |m| \leq l < n.$$

A dépend d'un paramètre E : le niveau d'énergie de l'atome ; l'équation (9.2) peut être résolue en E et définit une fonction à valeurs réelles

$$(l, m, n) \mapsto E(l, m, n)$$

du triplet d'entiers (l, m, n) tel que :

$$(9.3) \quad |m| \leq l < n$$

ces entiers sont les trois entiers quantiques ; les valeurs de E sont les niveaux d'énergie quantiques.

Le théorème 8 prouve le 1) du

THEOREME 9 . - 1) Les valeurs de E telles que l'équation a U = 0 possède des solutions lagrangiennes U, d'ordre 1, à support compact, sont les niveaux d'énergie quantiques.

2) Les valeurs de E telles que cette équation a U = 0 possède des solutions lagrangiennes U (d'ordre ∞) définies sur un tore T³(L,M) sont encore les niveaux d'énergie quantiques.

3) Les valeurs de E telles que l'équation a u = 0 possède une solution u, fonction à gradient de carré sommable, sont encore les niveaux d'énergie quantiques.

10. L'EQUATION DE DIRAC . - Son inconnue est un couple (u', u'') de fonctions E³ → C²; elle dépend du paramètre E ∈ R, qui est le niveau d'énergie de l'atome; elle contient trois 2 × 2 matrices, σ₁, σ₂, σ₃, self-adjointes, de traces nulles, à coefficients ∈ C, qui vérifient les relations :

$$\sigma_k^2 = 1, \sigma_j \sigma_k = -\sigma_k \sigma_j \text{ si } j \neq k,$$

$$\sigma_2 \sigma_3 = i \sigma_1, \sigma_3 \sigma_1 = i \sigma_2, \sigma_1 \sigma_2 = i \sigma_3;$$

elle contient le potentiel électro-magnétique

$$(10.1) \quad (A_0, A_1, A_2, A_3) = \left(\frac{\alpha}{R}, -\beta x_2, \beta x_1, 0 \right);$$

β² est négligeable; si l'on prend pour unités la masse de l'électron, la vitesse de la lumière et la constante de Planck ħ, cette équation de Dirac s'écrit

$$(10.2) \quad [(E + A_0) + \sum_{k=1}^3 \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} + A_k \right) \sigma_k] u' = u''$$

$$[(E + A_0) - \sum_k \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} + A_k \right) \sigma_k] u'' = u'$$

Cherchons ses solutions lagrangiennes d'ordre 1 à support compact; son hamiltonien est H², où

$$(10.3) \quad H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 (p_k + A_k)^2 - \frac{1}{2} (E + A_0)^2 + \frac{1}{2}$$

est, mod. β², du type (9.1).

Les variétés lagrangiennes compactes de l'hypersurface $W : H = 0$ sont les mêmes qu'aux n° 8 et 9. Limitons-nous à l'étude de celles d'entre elles qui sont des tores $T^3(L, M)$.

Le fait que l'hamiltonien H^2 s'annule deux fois sur W entraîne que les conditions quantiques de Maslov diffèrent de celles qui intervenaient n°8 et 9 ; ces conditions ne vont plus dépendre de V seulement ; la construction sur V d'une solution lagrangienne ne sera plus banale.

Cette construction se réduit à celle d'une fonction $v : T^3(L, M) \rightarrow \mathbb{C}^2$, par intégration, le long des m -caractéristiques engendrant $T^3(L, M)$, de l'équation différentielle suivante, où

$\mathcal{E} = - \text{grad } A_0$ est le champ électrique,

$\mathcal{H} = \text{rot } (A_1, A_2, A_3)$ est le champ magnétique :

$$(10.4) \quad \frac{1}{i} \frac{dv}{dt} + \frac{1}{2} \sum_k \mathcal{H}_k \sigma_k v - \frac{1}{2} \frac{1}{1 + E + A_0} \begin{vmatrix} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 \\ p_1 + A_1 & p_2 + A_2 & p_3 + A_3 \\ \mathcal{E}_1 & \mathcal{E}_2 & \mathcal{E}_3 \end{vmatrix} v = 0 ;$$

dans cette équation, le potentiel-vecteur magnétique (A_1, A_2, A_3) est négligeable.

L'expression (10.1) du potentiel conduit au changement d'inconnue

$$(10.5) \quad v = e^{-\frac{1}{2} \Phi \sigma_3} w ,$$

où la fonction a valeurs matricielles

$$(10.6) \quad \Phi \mapsto e^{-\frac{1}{2} \Phi \sigma_3}$$

est définie sur un revêtement d'ordre 2 de $T^3(L, M)$; l'équation (10.4) devient :

$$(10.7) \quad \frac{1}{i} \frac{dw}{dt} + \frac{\beta}{2} \sigma_3 w + \frac{\alpha}{2R^3} \frac{L}{1 + E + A_0} (\sigma_1 \sin \theta + \sigma_3 \cos \theta) w = 0 .$$

Le coefficient de w est une fonction périodique de t , de période c , à valeurs

$$(10.8) \quad w_{\pm}(t+c) = e^{\pm 2\pi i \epsilon} w_{\pm}(t) \text{ pour tout } t$$

Les fonctions (10.6), w_{\pm} et la fonction N , définie par (8.7), valant

$$(10.9) \quad N(L,M) = \frac{\alpha E}{\sqrt{1+2\beta M - E^2}} - \sqrt{L^2 - \alpha^2},$$

permettent d'expliciter la condition quantique de Maslov ; elle s'énonce comme suit :

$$(10.10) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Il existe trois entiers} \\ \ell = L - \frac{1}{2}, \quad m + \frac{1}{2} = M + \frac{1}{2}, \quad n \\ \text{tels que} \\ 0 \leq \ell < n, \quad |m| \leq \ell + \frac{1}{2} \\ n = \ell + \frac{1}{2} + N(\ell + \frac{1}{2}, m) \mp \epsilon, \\ \text{les signes } \pm \text{ et } \mp \text{ étant opposés.} \end{array} \right.$$

Nommons niveaux d'énergie quantiques de l'équation de Dirac les valeurs de E vérifiant cette condition (10.10).

Nous avons ainsi prouvé le 1) du théorème suivant :

THEOREME 10. - 1) ; Les valeurs de E telles que l'équation de Dirac possède une solution lagrangienne définie sur un tore $T^3(L,M)$ sont les niveaux d'énergie quantiques.

2) Ces niveaux sont très voisins des valeurs de E pour lesquelles l'équation de Dirac possède une solution qui soit un couple de fonctions, à valeurs dans \mathbb{C}^2 , à dérivées premières de carrés sommables.

Pour prouver 2) , il suffit d'expliciter les niveaux d'énergie quantiques. Voici comment on peut le faire approximativement.

Dans (10.7), le coefficient de w est petit ; vu (10.3) et (8.6)

$$\beta = H_M = -\mu_t ;$$

donc, vu (8.8)

$$\beta \epsilon = -2\pi N_M ;$$

UNIVERSITÉ DE GRENOBLE I
LABORATOIRE
DE MATHÉMATIQUES PURES
INSTITUT FOURIER

de même :

$$\int_t^{t+\epsilon} \frac{\alpha}{R^3} \frac{L}{1+E+A_0} dt \simeq -2\pi(1+N_L) ;$$

d'où :

$$4e^2 \approx (1 + N_L)^2 + 2(1 + N_L) N_M \cos \theta + N_M^2, \text{ où } \cos \theta = \frac{M}{L} = \frac{2m}{2\ell+1}$$

La résolution approchée de (10.10)₃ en E, dont dépend N, introduit

- la fonction E(.,.) valant

$$E(L,n) = \left[1 + \frac{\alpha^2}{n - L + \sqrt{L^2 - \alpha^2}} \right]^{-\frac{1}{2}};$$

- sa dérivée E_L ;

- les triplets d'entiers

$$(10.10)_1 \quad \ell, m + \frac{1}{2}, n$$

vérifiant

$$(10.10)_2 \quad 0 \leq \ell < n, \quad |m| \leq \ell \pm \frac{1}{2};$$

- la fonction, définie sur l'ensemble de ces triplets et ayant pour valeur :

$$(10.11) \quad E\left(\ell + \frac{1}{2}, n\right) + \beta m \pm \frac{1}{2} \sqrt{E_L^2 + \frac{4m}{2\ell+1} \beta E_L} \left(\ell + \frac{1}{2}, n\right) + \beta^2,$$

les signes \pm de (10.10)₂ et (10.11) étant les mêmes.

Les valeurs de cette fonction sont très voisines des niveaux d'énergie quantiques.

Or ces valeurs se trouvent être exactement les valeurs approchées des niveaux d'énergie que donnent les calculs classiques de la mécanique ondulatoire. C'est ce qu'énonce le 2) du théorème 10.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] LERAY J. Solutions asymptotiques et groupe symplectique : Colloque de Nice (1974) :
- Opérateurs intégraux de Fourier et équations aux dérivées partielles, (Lecture Notes, Springer)
- Application de la théorie de Maslov des développements asymptotiques à l'équation de Schrödinger ; Colloque d'Aix-en-Provence (1974) : Géométrie symplectique et physique mathématique.
- [2] MASLOV, V.P., Théorie des perturbations et méthodes asymptotiques (M.G.U, Moscou 1965).
- ARNOLD, V.I. Une classe caractéristique intervenant dans les conditions de quantification, Analyse fonctionnelle 1 (1967) 1-14.
- BOUSLAEV, V.C. Intégrale génératrice et opérateur canonique de Maslov par la méthode W.K.B. Traduits du russe par LASCoux, J. et SENEOR, R. (Dunod 1972).

UNIVERSITÉ DE GRENOBLE I
LABORATOIRE
DE MATHÉMATIQUES PURES
INSTITUT FOURIER