

Document de synthèse

Présenté pour obtenir

L'HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Mention Mathématiques et Applications

par

François CASTELLA

Université de Rennes 1
Institut de Recherche Mathématique de Rennes - École Doctorale MATISSE
U.F.R. de Mathématiques

TITRE DE L'HABILITATION :

*Analyse haute-fréquence, et modèles statistiques quantiques :
une approche cinétique.*

Soutenue le 10 décembre 2001 devant la Commission d'Examen

COMPOSITION DU JURY :

M. P. Gérard
M. F. Golse (rapporteur)
M. E. Grenier (rapporteur)
M. G. Métivier
M. F. Nier
M. B. Perthame
M. J. Rauch (rapporteur - absent)
M. W. Strauss (absent)

Contents

1	Introduction	2
2	De l'équation de Schrödinger à l'équation de Boltzmann des semi-conducteurs	7
2.1	Position générale du problème physique	7
2.2	Dérivations mathématiques rigoureuses	8
2.3	Résultats présentés dans ce mémoire	9
2.3.1	Limite lorsque $T \rightarrow \infty$ et $L \equiv 1$ ([7])	10
2.3.2	La limite simultanée $L \rightarrow \infty$ et $T \rightarrow \infty$ ([11], [12])	12
2.3.3	Introduction d'un paramètre d'amortissement $\alpha > 0$; limite simultanée $T \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, suivie de la limite $\alpha \rightarrow 0$ ([8], [9], [10])	18
2.3.4	Conclusion sur les trois limites précédentes : comportement de certaines sommes discrètes oscillantes	23
3	L'équation de Fokker-Planck comme limite de systèmes quantiques réversibles	24
3.1	Le Hamiltonien de Caldeira et Leggett	24
3.2	Résultats présentés dans ce mémoire ([14])	27
4	Limite haute-fréquence dans l'équation d'Helmholtz	32
4.1	L'équation d'Helmholtz haute-fréquence	32
4.2	Asymptotique formelle ([15], [16])	33
4.3	Résultats précis de convergence ([15], [16])	38
5	Appendice : effets dispersifs dans les équations de Vlasov et de Schrödinger ([1], [2], [3], [4], [5], [6])	44
6	Travaux de l'auteur ou en collaboration, classés par thèmes	47
7	Bibliographie	49

1 Introduction

Ce mémoire aborde deux thèmes reliés. D'une part, nous analysons le comportement à haute fréquence de certaines équations aux dérivées partielles linéaires, de type Schrödinger, telles qu'on en rencontre couramment dans la modélisation des semi-conducteurs, ou dans la description de la propagation d'ondes. Classiquement, nous adoptons pour cela un point de vue cinétique, tourné pour partie vers la notion de transformée de Wigner : une telle approche permet de décrire précisément les phénomènes oscillatoires pris en compte par ces équations. Nous obtenons à la limite des modèles asymptotiques qui décrivent la propagation de l'énergie ou d'autres quantités du même type. Nous justifions ainsi mathématiquement certaines équations proposées par la physique dans ce cadre. Notre deuxième thème emprunte à des questions de physique statistique. Il s'agit de dériver rigoureusement des modèles décrivant des dynamiques irréversibles en temps, partant d'équations associées à des dynamiques réversibles. De très nombreux travaux abordent ce thème d'un point de vue probabiliste, et nous avons *a contrario* souhaité adopter ici un point de vue déterministe.

Le travail présenté dans ce mémoire est regroupé en trois parties indépendantes que nous détaillons plus bas. Dans un appendice (section 5), nous fournissons aussi un résumé de travaux effectués dans la thèse. Si le présent mémoire adopte un point de vue cinétique dans le but de *dériver* certains modèles asymptotiques (linéaires), l'appendice traite en revanche, toujours d'un point de vue cinétique, des questions de *régularité* dans des équations aux dérivées partielles non linéaires.

Dans la première partie (section 2), qui regroupe les références [7]¹ à [13], on s'intéresse à la convergence de l'équation de Von Neumann (linéaire) vers l'équation de Boltzmann.

Situons d'abord le problème physique. On considère la dynamique quantique d'un électron, ou d'un faisceau d'électrons, dans un champ d'obstacles. On se place dans un régime où l'interaction avec les obstacles est "faible", et l'on veut quantifier l'effet en temps "long" de celle-ci. Ce type de situation intervient naturellement dans l'analyse du transport de charges dans les semi-conducteurs, où les électrons sont amenés à traverser des cristaux contenant des impuretés, présentes en faible quantité ([MRS], [Fi]). Une telle situation est *a priori* modélisée par l'équation de Schrödinger avec potentiel, où le potentiel rend compte de l'interaction avec le champ d'obstacles, ou bien par une légère généralisation de cette équation, connue sous le nom d'équation de Von Neumann, qui est valable lorsque l'on considère non pas la dynamique d'un seul électron mais plutôt celle d'un mélange statistique d'électrons. Dans le régime en temps long et potentiel petit considéré, la résolution de l'équation de Schrödinger, ou de l'équation de Von Neumann, est contraignante, et il est courant de la remplacer par un modèle asymptotique ([MRS], [Fi], [Ck]). La physique affirme en effet (citons entre autres [Pa], [VH1,2,3], [Pr], [Kr], [Vk], [Mei], [Ja]) que dans ce cas, la dynamique limite suivie par l'électron est correctement décrite par une équation linéaire de type Boltzmann.

Le point de départ de notre travail, et de nombreux autres travaux, consiste à tenter de justifier mathématiquement l'utilisation de tels modèles asymptotiques : si le paramètre

¹Ici et dans la suite du texte, les travaux auxquels j'ai participé, seul ou en collaboration, sont référencés par des chiffres, et les autres articles par des lettres reprenant - plus ou moins - les initiales des auteurs concernés.

générique $\varepsilon > 0$ mesure la taille de l'interaction et l'échelle de temps considérés, il s'agit de montrer que l'équation de Schrödinger (ou de Von Neumann) convenablement mise à l'échelle en fonction de ε , converge, lorsque ε tend vers 0, vers une équation de Boltzmann.

Avant de décrire notre contribution, nous souhaitons mentionner trois aspects particuliers liés à ce passage à la limite, qui motivent notre approche : **1)** de nombreux travaux ([Sp1], [EY1,2], [La], [HLW], et plus récemment [PV]) ont adopté une approche probabiliste pour justifier cette asymptotique. Ils établissent des résultats "en espérance" : on montre par exemple que, pour *presque toute* répartition d'obstacles, la dynamique de l'électron est en effet asymptotiquement décrite par une équation de Boltzmann. Une telle convergence ne peut d'ailleurs en aucun cas avoir lieu *pour toutes* les répartitions d'obstacles, car l'équation de Boltzmann est irréversible en temps, alors que l'équation de Schrödinger est réversible. **2)** l'équation de Boltzmann que l'on cherche à exhiber par passage à la limite fait intervenir un coefficient appelé "section efficace", et le problème du calcul effectif de ce coefficient est crucial. Nous renvoyons par exemple à [Ni1,2] pour des calculs de ce type. **3)** l'approche physique traditionnelle du problème, telle qu'on la trouve par exemple dans [CTDL], [CTDRG], [Boh], [Ck], commence par considérer l'évolution quantique d'un électron dans une boîte de taille *fixe*, disons L . Dans ce cas l'électron possède un nombre discret de niveaux d'énergie. Une analyse spectrale simple permet alors, pour L fixé, de transformer l'équation de Schrödinger en un système discret portant sur les niveaux d'énergie. Sur le système ainsi obtenu, on fait ensuite tendre *simultanément* le paramètre générique ε vers 0, et la taille de la boîte vers l'infini. Formellement, ceci permet d'une part de forcer la convergence de l'équation de Schrödinger vers l'équation de Boltzmann, et d'autre part d'obtenir à la limite un continuum de niveaux d'énergie, ce qui est crucial car l'équation de Boltzmann formellement attendue n'a véritablement de sens que dans ce dernier cas. Cette double limite n'est pas sans poser de sérieuses difficultés mathématiques et physiques, comme souligné par M. Combescot dans [Co].

Au regard des trois points ci-dessus, la motivation de notre travail est triple : d'abord nous souhaitons nous cantonner à une approche déterministe, dans l'esprit des travaux de F. Golse *et al.* ([BGW], [BGC], [BG]) pour la mécanique classique. Ensuite, nous voulons clarifier la dichotomie entre spectre discret et spectre continu dans ce cadre, et en particulier clarifier la limite simultanée $\varepsilon \rightarrow 0$, $L \rightarrow \infty$, citée plus haut. Enfin, nous désirons montrer que la section efficace mathématiquement obtenue par passage à la limite coïncide avec la valeur prédite par la physique. Pour toutes ces raisons, nous avons systématiquement étudié des passages à la limite sur le cas modèle de l'équation de Von Neumann périodique, c'est-à-dire posée sur le domaine $[-L, L]^d$ avec conditions aux limites périodiques. Nous souhaitons néanmoins souligner que tous nos travaux s'adaptent aisément au cas, plus physique, de conditions de type Dirichlet, c'est-à-dire lorsque l'électron se déplace dans une boîte $[-L, L]^d$ et rebondit aux bords (voir remarque 2.1 plus bas). Nous établissons les trois résultats suivants :

1) dans [7], on maintient L fixé ($L = 1$), et l'on fait tendre le paramètre générique ε vers zéro. On montre que l'équation limite n'est pas l'équation de Boltzmann formellement attendue, et qu'elle est de plus réversible en temps. Le système avec spectre purement discret ne peut donc être décrit par une équation de type Boltzmann.

2) dans [11], [12], on fait simultanément tendre L vers l'infini et ε vers zéro, comme dans l'approche physique conventionnelle. Les paramètres ε et L sont alors nécessairement liés par une relation simple. Le système a alors naturellement tendance à développer de

fortes oscillations, liées au fait que l'on travaille sur le tore. Nous quantifions précisément ces dernières en termes de théorie des nombres, et l'on montre qu'elles donnent lieu à une dynamique limite encore une fois *réversible* en temps. L'apparition de considérations arithmétiques est très naturelle dans le présent contexte périodique, et nous renvoyons par exemple à [BGW] pour une utilisation analogue de théorie des nombres dans un cadre de physique statistique, ou encore aux travaux de J. Bourgain [Bo1,2] dans un cadre différent.

3) les points **1)** et **2)** ci-dessus montrent que l'on ne peut pas passer directement à la limite dans le système périodique et obtenir une équation de Boltzmann. Dans [8], [9], [10], on introduit alors dans l'équation de Von Neumann originale un paramètre supplémentaire d'amortissement, noté $\alpha > 0$: il rend phénoménologiquement compte de l'interaction du système { électron + obstacle } avec des photons. Une telle modification du modèle est naturelle du point de vue de la physique, voir [Hu] pour une discussion de ce point, ou encore, pour des modèles semblables de type "électron couplé à un réservoir extérieur", [Dü], [14]. Sur un plan technique, ce paramètre introduit un terme d'amortissement dans l'équation de Von Neumann originale et rend donc l'équation modifiée d'emblée irréversible en temps. L'amortissement permet enfin de "lisser" les fortes oscillations vues au point **2)** ci-dessus, et l'analyse mathématique est ici complètement différente : on montre, grâce à la théorie des intégrales oscillantes, que, si l'on fait d'abord tendre ε vers zéro et L vers l'infini (ε et L sont alors liés par une relation simple), *puis*, dans un deuxième temps, tendre le paramètre α vers zéro (ces deux limites ne commutent pas en vertu du point **2)** ci-dessus), on obtient en effet l'équation de Boltzmann prévue par la physique. On montre aussi que la section efficace obtenue coïncide avec la section efficace physiquement pertinente.

Dans la deuxième partie (section 3), qui reprend l'article [14], on s'intéresse à la convergence de certaines équations de Von Neumann linéaires, qui interviennent par exemple dans le cadre de l'interaction lumière-matière, vers des équations diffusives de type Fokker-Planck.

Situons le problème physique. On considère la dynamique quantique d'un électron couplé à un grand nombre N de photons (modes d'oscillation du rayonnement électromagnétique) ou de phonons (modes d'oscillation des réseaux cristallins). On se place d'emblée dans la limite où N tend vers l'infini, qui est naturelle dans ce cadre. L'évolution de l'électron, ou de la particule test, est alors décrite par une équation de Von Neumann réversible en temps, et l'interaction avec le champ de photons/phonons à ce stade est prise en compte par un terme de couplage de forme compliquée. À partir de cette situation modèle, de très nombreux travaux physiques s'intéressent au comportement asymptotique de l'électron dans une variété de régimes, de type "couplage petit". Nous renvoyons tout d'abord aux travaux de Feynman, Hibbs, et Vernon [FH], [FV], et plus récemment à [CL1,2], [CTDRG], [De], [Di1,2], [Ha], [HR], [UZ]. Toutes ces approches ont la particularité commune de conduire, au moins formellement, à une dynamique limite irréversible en temps, décrite par des équations de type Fokker-Planck : à la limite, l'interaction avec le champ de photons/phonons induit un phénomène de diffusion de l'électron dans sa variable de vitesse. L'usage de modèles de type Fokker-Planck en lieu et place de l'équation de Von Neumann est courant dans l'étude de l'interaction lumière-matière, voir par exemple [CTDRG].

Dans ce mémoire ([14]), nous justifions mathématiquement de tels passages à la limite pour un modèle particulier introduit dans [CL1]. L'approche présentée dans [CL1]

est assez représentative des autres dérivations formelles que l'on peut trouver dans la littérature physique, ainsi que des études mathématiques sur ce type de sujets (citons [SDLL], [CLL], [JP], [Ar]) : elle part en effet d'une situation simplifiée, décrite par un Hamiltonien "quadratique", donc "intégrable" - ces termes sont précisés plus bas - pour le système électron/photon, ou électron/phonon, de départ. C'est cette hypothèse qui, dans tous les travaux cités ainsi que dans [14], permet de traiter de manière rigoureuse la limite où le nombre N de photons/phonons tend vers l'infini. Notre contribution est double. D'abord, nous clarifions la limite formelle proposée dans [CL1], tant du point de vue mathématique que du point de vue du régime asymptotique correct. En particulier, nous remplaçons l'usage systématique d'intégrales de Feynman fait dans [CL1] (un objet qui n'a pas de définition mathématique rigoureuse), par un point de vue cinétique, *via* la transformée de Wigner [Wi]. Nous mettons aussi en évidence que le mécanisme à l'origine du terme de diffusion dans la limite introduite par [CL1] repose sur une série d'hypothèses restrictives, tant du point de vue de la modélisation, que du point de vue mathématique. C'est la raison pour laquelle, dans un deuxième temps, nous proposons d'autres asymptotiques plus générales qui, par un mécanisme intrinsèque de résonance entre certaines d'oscillations (voir [CTDRG]), fournissent également des modèles diffusifs à la limite.

Dans la troisième partie (section 4), qui reprend les articles [15] et [16], on s'intéresse à certaines limites haute-fréquence dans l'équation d'Helmholtz (linéaire).

L'équation d'Helmholtz modélise, de manière simplifiée, la propagation d'ondes dans un milieu possédant un certain indice de réfraction, *a priori* variable. On considère un régime haute-fréquence, c'est-à-dire que la longueur d'onde typique est mesurée par un petit paramètre $\varepsilon > 0$. Alternativement, les ondes se propagent en "oscillant" à la fréquence $1/\varepsilon$. Par ailleurs, dans notre modèle, on place une source de rayonnement qui présente elle-même des "oscillations" à la fréquence $1/\varepsilon$. En particulier, et c'est un point important, on suppose que cette première est très localisée dans certaines régions de l'espace comme, par exemple, une boule de rayon ε (source quasi-ponctuelle), ou bien un petit voisinage de taille ε d'une surface Γ donnée. On peut penser à une antenne émettrice de faible étendue ε autour d'un point, ou autour de Γ . L'équation d'Helmholtz considérée permet de calculer, en tout point de l'espace, l'onde induite par le terme d'émission. La résolution directe de cette première est délicate. En particulier, une approche numérique nécessite *a priori* l'usage de maillages de taille typique ε , donc des temps de calcul de l'ordre de $1/\varepsilon^d$ (d est la dimension d'espace), ce qui est rédhibitoire pour les petites valeurs de ε . C'est pourquoi on cherche d'emblée un modèle asymptotique. La spécificité de la source considérée fait que les méthodes de type "optique géométrique" (voir [Ra], voir aussi [Be], [BS] pour un point de vue numérique) sont inopérantes ici. Pour cette raison, on adopte, dans l'esprit des travaux [LP], [Ta], [Ge], [GMMP], une approche par transformée de Wigner [Wi]. L'optique géométrique vise, pour des phénomènes présentant de fortes oscillations comme ici, à calculer, en tout point, la "phase" et l'"amplitude" naturellement associées, tandis que la transformée de Wigner n'en calcule que des valeurs "moyennes".

Une telle approche est très classique dans l'analyse de l'équation de Schrödinger, et à cet égard, la spécificité de notre travail est double : d'abord, on traite ici de l'équation de Helmholtz, qui est une version indépendante du temps de l'équation de Schrödinger ; ceci entraîne que l'on n'a pas naturellement d'équation fermée permettant de calculer, à la limite, l'inconnue du problème, contrairement au cas de l'équation de Schrödinger.

Egalement, le traitement du terme source dans l'équation de Helmholtz nécessite un travail particulier. Nous montrons ainsi qu'asymptotiquement, et dans certains régimes, la propagation des oscillations est décrite par une équation de transport (ce qui est classique), et qui présente (c'est là l'originalité du travail) un terme source qui est la trace, à la limite, du terme d'émission dans le modèle de départ. Nous exhibons aussi d'autres situations pour lesquelles le rayonnement *ne se propage pas* en dehors de Γ (les oscillations sont "capturées"). La difficulté mathématique est triple. Premièrement, les solutions de l'équation d'Helmholtz ne sont pas naturellement bornées dans L^2 (contrairement aux solutions de l'équation de Schrödinger). Il s'agit donc d'obtenir sur celles-ci des bornes de type L^2 à poids, dont certaines sont établies dans [PV]. Il s'agit aussi de transférer ces bornes sur les différentes quantités obtenues par transformation de Wigner. Deuxièmement, l'unicité des solutions considérées repose sur la spécification d'une condition dite de radiation à l'infini, et il s'avère délicat de suivre cette condition le long du processus de passage à la limite lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. C'est cette condition qui permet d'obtenir une équation fermée à la limite. Troisièmement, il nous faut analyser l'interaction entre les oscillations de la source et celles du milieu considéré. Ceci nous amène à des considérations géométriques sur la nature des oscillations pertinentes.

Dans chacune des sections 2 à 4, nous nous sommes efforcés de donner, séparément, d'abord une description complète des modèles respectifs, ensuite des énoncés (simplifiés) des Théorèmes que nous obtenons, et enfin une esquisse de preuve pour chaque résultat.

2 De l'équation de Schrödinger à l'équation de Boltzmann des semi-conducteurs

2.1 Position générale du problème physique

Dans ce paragraphe, nous précisons le cadre physique général qui permet de faire le lien entre l'équation de Schrödinger, ou de Von Neumann, et l'équation de Boltzmann. Nous introduisons aussi certaines notations utilisées dans la suite.

On considère ici la dynamique quantique d'un électron dans un champ d'obstacles repérés par leurs positions $X_j \in \mathbb{R}^d$, où $j \in \mathbb{N}$ est un indice de numérotation. Pour simplifier on suppose que chaque obstacle crée au point $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ le potentiel $\lambda V(\mathbf{x} - X_j)$, où V est une fonction *fixe*, à valeurs réelles, et $\lambda \in \mathbb{R}$ est une constante de couplage. Ici, V est choisi suffisamment petit, régulier, et décroissant pour disposer d'une théorie raisonnable du scattering quantique pour V ([RS]). Dans ces conditions, l'électron subit l'influence du potentiel total,

$$V_{\text{tot}}(\mathbf{x}) = \lambda \sum_j V(\mathbf{x} - X_j), \quad (2.1)$$

au point \mathbf{x} , où la somme est localement finie. La dynamique quantique de l'électron est décrite par l'équation de Schrödinger, ou de Von Neumann, avec potentiel total V_{tot} .

On distingue dès lors deux régimes asymptotiques différents, qui apparaissent naturellement en physique des semi-conducteurs ([MRS]). Ceux-ci correspondent tous deux à une limite du type "temps long/ potentiel total petit". Le premier est connu sous le nom de limite *faible couplage* (weak coupling limit), ou encore limite de Van-Hove ([VH1,2,3]). On suppose dans cette situation que la constante de couplage λ dans (2.1) est petite, de sorte que chaque "collision" avec un obstacle a un petit effet d'ordre λ^2 sur la dynamique (c'est une conséquence de la règle d'or de Fermi (2.5) ci-dessous). On suppose aussi que les obstacles sont répartis de manière à trouver en moyenne un obstacle par unité de volume, et on considère la dynamique de l'électron sur des temps longs d'ordre $1/\lambda^2$. Dans la limite lorsque $\lambda \rightarrow 0$, qui constitue la limite faible couplage, l'électron subit donc de très nombreuses collisions avec les obstacles (de l'ordre de $1/\lambda^2$), mais chaque collision a une influence petite (d'ordre λ^2). C'est l'effet cumulé de toutes les collisions qui modifie la dynamique d'une quantité d'ordre un. Le second régime est connu sous le nom de régime *faible densité* (low-density regime), ou également régime de Boltzmann-Grad (voir [CIP]). Dans ce cas, les obstacles sont distribués de manière à trouver en moyenne une petite quantité $\varepsilon > 0$ d'obstacles par unité de volume, et la constante de couplage λ est maintenue égale à un. On considère la dynamique sur des temps longs d'ordre $1/\varepsilon$. Dans la limite lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, qui constitue la limite faible densité, l'électron rencontre en moyenne un nombre fini d'obstacles, mais chaque rencontre a immédiatement un effet d'ordre un sur la dynamique.

Dans ces deux asymptotiques, la physique prévoit que l'évolution de l'électron peut être asymptotiquement décrite par une équation de Boltzmann linéaire. Nous renvoyons à [Pa], [VH1,2,3], [KL1,2], [Ku], [Pr], [Vk], [Zw], ou également [Ck] (voir aussi [Fi] pour des développements physiques plus récents, voir enfin [KPR] pour une approche plus mathématique, mais toujours formelle). L'équation mentionnée s'écrit,

$$\partial_t f(t, \mathbf{n}) = \int_{\mathbb{R}^d} [\Sigma(\mathbf{n}, \mathbf{k}) f(t, \mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, \mathbf{n}) f(t, \mathbf{n})] d\mathbf{k}, \quad (2.2)$$

dans le cas homogène en espace, auquel nous nous restreindrons dans la suite. Ici, $f(t, \mathbf{n})$ représente la probabilité, à l'instant $t \in \mathbb{R}$, que l'électron possède l'impulsion $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^d$. Le second membre de (2.2) possède la structure usuelle d'un terme de gain diminué d'un terme de perte. A l'instant t , l'électron peut transiter de l'impulsion \mathbf{k} à l'impulsion \mathbf{n} , avec la probabilité $\Sigma(\mathbf{n}, \mathbf{k})$, d'où la contribution $\int \Sigma(\mathbf{n}, \mathbf{k})f(t, \mathbf{k}) d\mathbf{k}$ dans (2.2) - c'est là le terme de gain -, mais il peut aussi transiter de l'impulsion \mathbf{n} à une autre impulsion \mathbf{k} , avec la probabilité $\Sigma(\mathbf{k}, \mathbf{n})$, d'où la contribution $-\int \Sigma(\mathbf{k}, \mathbf{n})f(t, \mathbf{n}) d\mathbf{k}$ dans (2.2) - c'est là le terme de perte. La quantité $\Sigma(\mathbf{n}, \mathbf{k})$ est usuellement appelée *section efficace*.

Il faut ajouter que la valeur physiquement pertinente de la section efficace Σ dépend du régime asymptotique précis considéré dans l'équation de Schrödinger, ou de Von Neumann, initiale. Dans le régime faible densité, la physique prévoit en effet que la section efficace Σ apparaissant dans l'équation limite (2.2) est donnée par $\Sigma = \Sigma^{\text{ld}}$ (low-density), où l'on définit,

$$\Sigma^{\text{ld}}(\mathbf{n}, \mathbf{k}) = 2\pi\delta(\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2)|T(\mathbf{k}, \mathbf{n})|^2. \quad (2.3)$$

Ici, T est la "matrice T " usuelle en théorie quantique du scattering ([RS]) attachée au potentiel V , et exprimée en "représentation impulsion" (c'est-à-dire en variables de Fourier). Elle est définie par,

$$S(\mathbf{n}, \mathbf{k}) = \delta(\mathbf{n} - \mathbf{k}) - 2i\pi T(\mathbf{n}, \mathbf{k}), \quad (2.4)$$

où S est la matrice de scattering associée au potentiel V (toujours en représentation impulsion). Il est bien connu ([RS]) que $|T|^2$ admet un développement en série en puissances de \hat{V} , connu sous le nom de série de Born, dont le premier terme est,

$$|T(\mathbf{n}, \mathbf{k})|^2 = |\hat{V}(\mathbf{n} - \mathbf{k})|^2 + O(\hat{V}^3), \quad (2.5)$$

où \hat{V} désigne la transformée de Fourier du potentiel V . A contrario, dans le régime faible couplage, la physique prévoit que la section efficace Σ apparaissant dans l'équation limite (2.2) est donnée par $\Sigma = \Sigma^{\text{wc}}$ (weak-coupling), où,

$$\Sigma^{\text{wc}}(\mathbf{n}, \mathbf{k}) = 2\pi\delta(\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2)|\hat{V}(\mathbf{n} - \mathbf{k})|^2. \quad (2.6)$$

Cette égalité est connue sous le nom de "Règle d'or de Fermi". De telles sections efficaces sont couramment employées dans la modélisation des semi-conducteurs. Nous soulignons ici que Σ^{wc} coïncide avec le terme de plus bas ordre du développement en série de Σ^{ld} .

2.2 Dérivations mathématiques rigoureuses

De nombreux travaux mathématiques ont rigoureusement justifié, par une approche probabiliste, la convergence de l'équation de Schrödinger vers des équations du type (2.2) dans le régime faible couplage, avec la section efficace Σ^{wc} physiquement attendue. Nous souhaitons citer [Sp1], [HLW], [La], [EY1,2] (citons aussi [PV] pour une approche probabiliste un peu différente). Tous ces travaux (sauf [PV], où l'aléa est "dans la variable de temps") considèrent le cas d'obstacles aléatoirement distribués ($X_j \equiv X_j(\omega)$ où ω appartient à un espace de probabilités), et leurs résultats ont lieu en espérance par rapport à ω .

Nous souhaitons aussi citer [Ni1,2] pour une approche déterministe, mais ce travail (difficile) considère le cas d'un seul obstacle, de sorte que ce n'est pas une équation du type (2.2) qui est obtenue à la limite.

Nous souhaitons enfin citer [Dü] pour une approche de type "système couplé avec un réservoir" : ici, l'auteur considère un atome (plus précisément : un système quantique possédant un nombre fini de niveaux d'énergie) couplé avec un gaz de Fermi d'électrons. Ce dernier est supposé à l'équilibre thermodynamique initialement. Dans la limite *faible densité* qui est naturelle dans ce cadre, [Dü] montre que la dynamique de l'atome seul est asymptotiquement décrite par un semi-groupe possédant une partie dispersive de type Boltzmann. Le terme (linéaire) de Boltzmann exhibé dans [Dü] fait intervenir le développement en série de Born naturellement attaché à la perturbation considérée.

2.3 Résultats présentés dans ce mémoire

Notre travail vise à étudier mathématiquement des asymptotiques "temps long / potentiel petit" du type de celles évoquées dans le paragraphe 2.1, pour des configurations particulières, déterministes, d'obstacles. Nous nous limitons en fait à des configurations périodiques. Rappelons que nous souhaitons aussi clarifier mathématiquement la question du passage à la limite $L \rightarrow \infty$ sur la taille de la boîte, telle qu'on la rencontre en théorie conventionnelle du scattering ([Co]), et nous renvoyons à l'introduction sur ce point.

Pour ces raisons, dans toute la suite de la section 2.3, on se donne une échelle de temps T , et on considère la dynamique quantique d'un électron sur le domaine (tore) $[-\pi L, \pi L]^d$, de taille L , avec conditions aux limites périodiques. Le lien entre l'échelle de temps T et le paramètre L est précisé plus loin, il dépend des régimes considérés. On se donne également un potentiel V à valeurs réelles, qui modélise un obstacle placé à l'origine, et l'on suppose dans toute la suite de cette section 2.3 que,

$$V \text{ est régulier, petit, et supporté près de l'origine.} \quad (2.7)$$

(voir les articles correspondants pour les hypothèses précises : les conditions de (2.7), permettent d'obtenir une série de Born (2.5) convergente). On se donne une constante de couplage $\lambda \in \mathbb{R}$, et on part de l'équation de Von Neumann avec potentiel λV . Après transformation de Fourier (celle-ci est indexée par les entiers $n \in \mathbb{Z}^d$ car on raisonne sur le tore), l'équation décrivant l'évolution de l'électron est,

$$\begin{aligned} \frac{i}{T} \partial_t \rho(t, n, p) &= \frac{p^2 - n^2}{L^2} \rho(t, n, p) \\ &+ \frac{\lambda}{L^d} \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \left[\widehat{V} \left(\frac{n - k}{L} \right) \rho(t, k, p) - \widehat{V} \left(\frac{k - p}{L} \right) \rho(t, n, k) \right], \end{aligned} \quad (2.8)$$

avec la donnée initiale,

$$\rho(0, n, p) = \frac{1}{L^d} \rho^0 \left(\frac{n}{L} \right) \mathbf{1}[n = p], \quad (2.9)$$

où ρ^0 est un profil donné, régulier et suffisamment décroissant à l'infini. On reconnaît au second membre de (2.8) la transformée de Fourier du commutateur avec l'opérateur

$-\Delta_{\mathbf{x}} + \lambda V(\mathbf{x})$, et nous renvoyons à [9] pour les détails de normalisation. Ici, \widehat{V} désigne la transformée de Fourier usuelle du potentiel V , définie par,

$$\widehat{V}(\mathbf{n}) = \int_{\mathbb{R}^d} V(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad \left(= \int_{[-\pi L, \pi L]^d} V(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) d\mathbf{x} \right), \quad (2.10)$$

et la dernière égalité provient de l'hypothèse de support compact sur V . Enfin, la donnée initiale (2.9) est choisie conformément à l'approche physique traditionnelle ([Ck]), et c'est une généralisation de l'équilibre thermodynamique à température inverse β pour l'équation (2.8) sans potentiel, pour lequel $\rho^0(\mathbf{n}) = \exp(-\beta \mathbf{n}^2)$.

La quantité $\rho(t, n, p)$ est connue sous le nom de matrice densité de l'électron (en représentation impulsion). Nous ne notons pas la dépendance de ρ par rapport aux différents paramètres d'échelle λ , T , et L pour alléger les notations. Les valeurs diagonales $\rho(t, n, n)$ quantifient la probabilité, à l'instant t , de trouver l'électron dans l'état propre $(2\pi L)^{-d/2} \exp(-in \cdot \mathbf{x}/L)$ du Laplacien $-\Delta_{\mathbf{x}}$ sur le tore $(\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z})^d$. En d'autres termes, il s'agit là de la probabilité que l'électron possède l'impulsion n/L . Les valeurs extra-diagonales $\rho(t, n, p)$ ($n \neq p$) représentent les corrélations entre les différents nombres d'occupation $\rho(t, n, n)$ et $\rho(t, p, p)$.

Dans le cas particulier où nous nous plaçons désormais, la question mathématique, qui traduit les considérations formelles du paragraphe 2.1 ci-dessus, est la suivante : peut-on procéder à un passage à la limite du type "potentiel petit/ temps long" dans (2.8), de manière à ce que les nombres d'occupation $\rho(t, n, n)$ satisfassent asymptotiquement une équation du type (2.2), quitte à poser $f = \text{"lim"} \rho(t, n, n)$ (dans un sens volontairement vague) ? Si oui, la section efficace obtenue coïncide-t-elle avec la section prévue par la physique ? Enfin, quel rôle joue le paramètre d'échelle L , et en particulier la limite $L \rightarrow \infty$, dans l'obtention d'une équation du type (2.2) ?

Nous décrivons maintenant trois régimes asymptotiques sur l'équation (2.8) qui apportent des réponses à ces questions. Nous renvoyons à [13] pour une synthèse de tous ces résultats.

Remarque 2.1 (conditions aux limites). Le cas de conditions aux limites périodiques considéré ici est pris comme modèle, mais il ne décrit pas tout à fait la véritable dynamique d'un électron dans une répartition périodique d'obstacles (cette dernière situation ressort de la théorie de Bloch). Néanmoins toute l'analyse présentée ici se transpose aisément au cas, plus physique, de conditions aux limites de Dirichlet, correspondant à un électron confiné dans une boîte de taille L , et qui rebondit aux bords. Tous les Théorèmes énoncés ici sont en particulier vrais, *mutatis mutandis*, dans ce dernier contexte.

2.3.1 Limite lorsque $T \rightarrow \infty$ et $L \equiv 1$ ([7])

Afin de mettre en évidence les effets liés au spectre discret, on commence par s'intéresser à l'asymptotique "temps grand/potentiel petit" dans (2.8) lorsque la taille de la boîte est fixée égale à un.

Dans ce cas, il est bien sûr nécessaire de normaliser la constante de couplage λ en fonction de l'échelle de temps T . La traditionnelle limite faible couplage correspond au choix $\lambda = 1/T^{1/2}$. Il ressort néanmoins d'une analyse simple de (2.8) que la seule normalisation

pertinente de (2.8) dans ce cas correspond au choix $\lambda = 1/T$. Ce seul point indique déjà que le cas d'un système avec spectre discret sort d'emblée du cadre physique standard permettant d'atteindre des dynamiques du type Boltzmann.

On obtient le résultat suivant ([7]),

Théorème 2.1 *Soit $\rho(t, n, p)$ la solution de (2.8) avec donnée initiale (2.9). On se place dans le régime,*

$$L \equiv 1, \lambda = 1/T, T \rightarrow \infty. \quad (2.11)$$

On se place finalement en dimension $d \geq 1$. Alors, la limite,

$$f_1(t, n) := \lim \rho(t, n, n), \quad (2.12)$$

existe dans $C^0(\mathbb{R}_t; l^1(\mathbb{Z}^d))$, et elle satisfait une équation intégralo-différentielle en temps, de la forme,

$$\partial_t f_1(t, n) = \int_0^t \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \left[\Sigma^1(t-s, n, k) f_1(s, k) - \tilde{\Sigma}^1(t-s, k, n) f_1(s, n) \right] ds, \quad (2.13)$$

avec donnée initiale $f_1(0, n) = \rho^0(n)$, pour certaines fonctions $\Sigma^1(s, n, k)$ et $\tilde{\Sigma}^1(s, n, k)$ explicitement calculables. En particulier, l'équation limite (2.13) est réversible en temps.

Remarque 2.2 On voit que l'équation limite (2.13) a bien la structure gain/perte de l'équation de Boltzmann (2.2), mais présente un phénomène de mémoire en temps : la dynamique à l'instant t dépend de toute la dynamique passée entre l'instant 0 et l'instant t , ce qui n'est bien sûr pas le cas dans l'équation de Boltzmann (2.2). Qualitativement, la solution de (2.13) a tendance à osciller sans converger vers aucun équilibre (contrairement à la solution de (2.2)). Ce comportement qualitatif se rapproche d'un phénomène physique connu sous le nom d'"oscillations Rabi" (voir [CTDRG]), caractéristique des systèmes à spectre discret.

Esquisse de preuve du Théorème 2.1

On distingue d'abord partie diagonale et partie extra-diagonale dans (2.8). Ceci nous amène à écrire pour la partie diagonale (compte-tenu de $\lambda = 1/T$),

$$i\partial_t \rho(t, n, n) = \sum_{k \neq n} \left[\hat{V}(n-k) \rho(t, k, n) - \hat{V}(k-n) \rho(t, n, k) \right], \quad (2.14)$$

et, pour la partie extra-diagonale ($n \neq p$),

$$\begin{aligned} i\partial_t \rho(t, n, p) &= T(p^2 - n^2) \rho(t, n, p) + \hat{V}(n-p) [\rho(t, p, p) - \rho(t, n, n)] \\ &+ \sum_{k \neq p} \hat{V}(n-k) \rho(t, k, p) - \sum_{k \neq n} \hat{V}(k-p) \rho(t, n, k). \end{aligned} \quad (2.15)$$

On résout alors (2.15) itérativement, pour obtenir un développement en puissances de \hat{V} , de la forme,

$$\rho(t, n, p) = -i \int_0^t \exp\left(iTs(n^2 - p^2)\right) \hat{V}(n-p) [\rho(s, p, p) - \rho(s, n, n)] ds + O(\hat{V}^2), \quad (2.16)$$

lorsque $n \neq p$. Ce développement exprime explicitement les valeurs extra-diagonales $\rho(t, n, p)$ en fonction des valeurs diagonales $\rho(t, n, n)$, et le terme $O(\widehat{V}^2)$ dans (2.16) fait référence aux termes d'ordre supérieur, dont la valeur est donnée dans [7]. On reporte maintenant (2.16) dans l'équation (2.14), ce qui donne,

$$\begin{aligned} \partial_t \rho(t, n, n) = & \hspace{15em} (2.17) \\ 2\text{Re} \int_0^t \sum_{k \neq n} \exp(iTs(k^2 - n^2)) |\widehat{V}(n - k)|^2 [\rho(s, k, k) - \rho(s, n, n)] ds + O(\widehat{V}^3). \end{aligned}$$

Il reste à passer à la limite $T \rightarrow \infty$ dans le terme oscillant $\exp(iTs(k^2 - n^2))$. On utilise à cette fin, pour l'essentiel, le Lemme de Riemann-Lebesgue, et on obtient,

$$\partial_t \rho(t, n, n) = 2 \int_0^t \sum_{k / k^2 = n^2} |\widehat{V}(n - k)|^2 [\rho(s, k, k) - \rho(s, n, n)] ds + O(\widehat{V}^3). \quad (2.18)$$

(Comparer à (2.2) avec les sections efficaces (2.3) ou (2.6)). Là encore, le terme $O(\widehat{V}^3)$ cache un développement qui est donné dans [7]. \square

Remarque 2.3 Comme on le voit, la méthode de preuve proposée ici repose sur la résolution explicite d'une certaine équation, par un développement itératif du type "formule de Duhamel itérée" (voir (2.15) et (2.16)). Les preuves de tous les Théorèmes donnés dans cette section 2 ainsi que dans la suivante reposent également, à un moment donné, sur un tel argument. Ce type d'approche est très général (et, accessoirement, très restrictif) dans le présent contexte où l'on étudie l'éventuelle convergence de certains modèles réversibles vers des modèles irréversibles. Nous renvoyons à l'article fondateur de O. Lanford [Lan], mais aussi à l'abondante littérature sur le sujet, [CIP], [BGC], [Sp1,2,3], [BBS], ...

2.3.2 La limite simultanée $L \rightarrow \infty$ et $T \rightarrow \infty$ ([11], [12])

Le précédent résultat montre qu'en vue d'obtenir effectivement la convergence vers une équation de Boltzmann (2.2) partant de (2.8), il est crucial de se placer dans une asymptotique où le spectre du système tend à être continu. Il est donc crucial de procéder à la limite $L \rightarrow \infty$ en même temps qu'à la limite "potentiel petit/temps long" dans (2.8). C'est l'objet de ce paragraphe.

Commençons par préciser le régime pertinent. L'équation (2.8) décrit l'évolution d'un électron dans une boîte périodique de volume L^d contenant *un* obstacle. Celui-ci occupe par hypothèse un volume d'ordre 1 dans la boîte. La "densité d'obstacles" est donc petite, d'ordre $1/L^d$, lorsque L est grand. En référence aux considérations générales du paragraphe 2.1, il est donc *a priori* naturel de se placer dans une asymptotique "faible densité", et de choisir par conséquent l'échelle de temps T de l'ordre de L^d , et de prendre d'autre part la constante de couplage λ d'ordre 1.

Néanmoins, comme dans le paragraphe 2.3.1, le caractère périodique du système force à se placer dans une asymptotique légèrement différente de la limite faible densité prévue comme étant "le bon" régime du point de vue de la physique. En effet, dans ce paragraphe, on se donne un paramètre $\delta > 0$ arbitrairement petit, et on se place dans le régime suivant,

$$L \rightarrow \infty, \quad \frac{T}{L^{2+\delta}} \rightarrow \infty, \quad \lambda \sim \frac{L^2}{T} \rightarrow 0. \quad (2.19)$$

(voir [11] pour des énoncés plus précis). Finalement, on se place en dimension $d \geq 3$. Lorsque $d \geq 3$, la seconde contrainte inclut le cas faible densité pour lequel $T = L^d$, mais elle inclut plus généralement toute échelle de temps T telle que $T \gg L^2$. Le Théorème 2.2 ci-dessous affirme que la dynamique limite est la même, quelle que soit l'échelle de temps $T \gg L^2$ considérée. Ceci contraste déjà avec le cadre physique et mathématique "standard", qui prévoit que la dynamique limite dépend fortement de l'échelle de temps choisie (équation de type Boltzmann lorsque $T = L^d$, équation de type diffusif pour les échelles de temps plus grandes). On renvoie à [GN] pour un comportement similaire dans certaines équations de Schrödinger périodiques. La troisième contrainte impose un couplage petit, ce qui est plus restrictif que le régime faible densité usuel, pour lequel $\lambda \sim 1$, et contraste de nouveau avec l'intuition du problème.

Pour anticiper un peu sur la suite, nous présentons très rapidement le mécanisme élémentaire qui gouverne l'asymptotique considérée ici. L'équation (2.8) s'écrit $i\partial_t \rho = (T/L^2)(n^2 - p^2)\rho + (\lambda T/L^d) \sum_k \widehat{V}([n-k]/L) \dots$. Pour cette raison, et comme le coefficient T/L^2 tend vers l'infini, on commence par montrer que les contributions à $\rho(t, n, p)$ liées aux entiers n et p de \mathbb{Z}^d tels que $n^2 = p^2$ sont dominantes, et que les autres contributions ($n^2 \neq p^2$) tendent vers 0, à la vitesse $L^{2+\delta}/T$, voir (2.27). Cette première partie de l'analyse repose sur la caractérisation arithmétique précise de la répartition des valeurs de n^2 lorsque n parcourt \mathbb{Z}^d , et c'est l'objet du Théorème 2.3 ci-dessous. La contrainte $T/L^{2+\delta} \rightarrow 0$ dans (2.19) provient de ces considérations arithmétiques. Dans un deuxième temps, on observe que la contribution de la somme $(\lambda T/L^d) \sum_k \widehat{V}([n-k]/L) \dots$ dans (2.8) se réduit asymptotiquement à $(\lambda T/L^d) \sum_{k/k^2=n^2} \widehat{V}([n-k]/L) \dots$. On montre alors que cette dernière somme, avec la contrainte arithmétique $k^2 = n^2$, est d'ordre 1 lorsque λ satisfait (2.19), et on calcule sa limite. La troisième contrainte dans (2.19) provient de ces considérations.

Nos résultats sont les suivants ([11]),

Théorème 2.2 *Soit $\rho(t, n, p)$ la solution de (2.8) avec donnée initiale (2.9). On définit (dans la représentation dite "d'interaction") la distribution $\rho_I(t, \mathbf{n}, \mathbf{p})$ par,*

$$\rho_I(t, \mathbf{n}, \mathbf{p}) := \sum_{(n,p) \in \mathbb{Z}^{2d}} \exp\left(i \frac{Tt}{L^2} [n^2 - p^2]\right) \rho(t, n, p) \delta\left(\mathbf{n} - \frac{n}{L}\right) \delta\left(\mathbf{p} - \frac{p}{L}\right). \quad (2.20)$$

On se place dans le régime (2.19). On suppose aussi que la dimension de travail satisfait $d \geq 3$.

Lorsque l'on suppose de plus $d \geq 5$, la distribution $\rho_I(t, \mathbf{n}, \mathbf{p})$ admet un développement en série convergent en puissances de \widehat{V} . Dans l'asymptotique (2.19), chaque terme de ce développement converge faiblement vers une distribution concentrée sur la sphère d'énergie $\{\mathbf{n}^2 = \mathbf{p}^2\}$, et que l'on peut explicitement calculer. La série limite ainsi obtenue définit une distribution $\rho_I^\infty(t, \mathbf{n}, \mathbf{p})$ qui est un développement convergent en puissances de \widehat{V} . De plus, l'évolution en temps de $\rho_I^\infty(t, \mathbf{n}, \mathbf{p})$ est réversible, dans le sens où elle est invariante par le changement $t \mapsto -t$, $i \mapsto -i$.

En dimensions $d = 4$ et $d = 3$, le même résultat a lieu à condition de faire une hypothèse arithmétique qui est précisée dans [11] (voir remarque 2.5).

Remarque 2.4

- 1-** Le Théorème 2.2 montre en particulier que la dynamique limite prévue par la physique dans un régime faible densité diffère, dans le présent cas périodique, de la dynamique limite mathématiquement correcte. Comme indiqué ci-après, ce fait repose sur des considérations purement arithmétiques, et liées à la périodicité. Le résultat de non-convergence présenté ici dans le cadre de la mécanique quantique est à mettre en parallèle avec le résultat suivant: il est montré dans [BBS] que la dynamique *classique* d'une sphère dure dans une répartition *aléatoire* d'obstacles peut être décrite, dans une limite de type faible densité, par une équation de Boltzmann, et ce pour presque toute répartition d'obstacles. Il est néanmoins prouvé dans [BGW] qu'une telle convergence n'a pas lieu dans le cas d'une répartition périodique, et ce dernier résultat s'appuie sur des considérations arithmétiques.
- 2-** Nous ne donnons pas l'expression explicite de ρ_I^∞ , qui ne présente pas d'intérêt particulier.
- 3-** Nous souhaitons souligner ici que la convergence mentionnée dans le Théorème 2.2 est relativement faible, dans la mesure où ce n'est qu'une convergence terme par terme de certaines séries en \widehat{V} . Nous ne sommes pas en mesure de dégager l'uniformité nécessaire pour passer à un résultat de convergence des séries elles-mêmes.
- 4-** Le passage en représentation d'interaction tel que défini par (2.20) est un procédé standard en mécanique quantique ([CTDL]).

Comme nous en esquissons la preuve plus loin, le Théorème 2.2 se trouve être une conséquence du Théorème suivant, d'intérêt indépendant. Il caractérise le comportement de sommes de Riemann de fonctions définies sur certains cônes. Nous énonçons ce Théorème en dimension $d \geq 5$ pour simplifier les notations, mais il admet une formulation semblable en dimensions $d = 4$ et $d = 3$ (voir remarque 2.5). Le point (i) est démontré dans [11], tandis que (ii) est montré dans [12],

Théorème 2.3 (i) Soit un entier $N \geq 1$ donné. Soit $\phi(\mathbf{k}_0, \dots, \mathbf{k}_N)$ une fonction test régulière et décroissante définie sur $\mathbb{R}^{(N+1)d}$, où $d \geq 5$. On définit la "somme de Riemann avec contrainte quadratique",

$$I_L(\phi) := \frac{1}{L^{d+N(d-2)}} \sum_{(k_0, \dots, k_N) \in \mathbb{Z}^{(N+1)d}} \phi\left(\frac{k_0}{L}, \dots, \frac{k_N}{L}\right) \mathbf{1}[k_0^2 = k_1^2 = \dots = k_N^2]. \quad (2.21)$$

Alors, $I_L(\phi)$ admet une limite lorsque $L \rightarrow \infty$. De plus, on a,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} I_L(\phi) = \gamma_{N,d} \int_0^{+\infty} \int_{(\mathbb{S}^{d-1})^{N+1}} r^{d-1+N(d-2)} \phi(r\mathbf{k}_0, r\mathbf{k}_1, \dots, r\mathbf{k}_N) dr d\sigma(\mathbf{k}_0) \cdots d\sigma(\mathbf{k}_N), \quad (2.22)$$

où $d\sigma$ désigne la mesure de surface euclidienne associée à la sphère \mathbb{S}^{d-1} , normalisée par $d\sigma(\mathbb{S}^{d-1}) = 1$. Ici, le coefficient $\gamma_{N,d}$ est un terme de nature arithmétique, qui dépend de la dimension d , et reflète le comportement, lorsque L tend vers l'infini, de la fonction $[\mathfrak{S}(L)]^N$, où \mathfrak{S} est la série singulière définie plus bas (2.25).

(ii) Le point (i) est une conséquence du Théorème suivant : pour tout domaine $\Omega \subset \mathbb{S}^{d-1}$,

mesurable par rapport à la mesure de surface euclidienne $d\sigma$, et pour toute dimension $d \geq 5$, l'asymptotique suivante a lieu,

$$\frac{\#\{n \in \mathbb{Z}^d \text{ tels que } n^2 = L^2, \text{ et } n/L \in \Omega\}}{\#\{n \in \mathbb{Z}^d \text{ tels que } n^2 = L^2\}} \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} d\sigma(\Omega), \quad (2.23)$$

où, comme il est connu,

$$\#\{n \in \mathbb{Z}^d \text{ tels que } n^2 = L^2\} \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\Gamma(1/2)^d}{\Gamma(d/2)} \mathfrak{S}(L^2) L^{d-2}, \quad (2.24)$$

et $\mathfrak{S}(L^2)$ est la "série singulière", définie comme,

$$\mathfrak{S}(L^2) := \sum_{q \geq 1} \frac{1}{q^d} \sum_{\substack{a=1 \\ \gcd(a,q)=1}}^q \left(\sum_{m=1}^q \exp\left(2i\pi \frac{am^2}{q}\right) \right)^d \exp\left(-2i\pi \frac{aL^2}{q}\right). \quad (2.25)$$

Remarque 2.5

1- Il est bien connu ([Gr], [Va]) que la série $\sum_q \dots$ (2.25) qui définit $\mathfrak{S}(L^2)$ a un terme général borné par $1/q^{(d-2)/2}$. C'est la raison pour laquelle la contrainte $d \geq 5$ apparaît naturellement dans notre énoncé du Théorème 2.3. Pour cette même raison, les coefficients $\gamma_{N,d}$ de l'égalité (2.22) se calculent aisément en dimension $d \geq 5$. Le point (ii) est vrai "en moyenne" dans les cas $d = 4$ ou $d = 3$, et nous renvoyons à [12] pour un énoncé précis. Le point (i) s'adapte dès lors facilement au cas de la dimension $d = 4$, avec des coefficients $\gamma_{N,4}$ dont on peut montrer l'existence, et nous renvoyons à [11]. En revanche, en dimension $d = 3$, le point (i) n'est vrai qu'à condition de faire une hypothèse arithmétique qui est précisée dans [11], et qui revient en somme à supposer l'existence des coefficients $\gamma_{N,3}$. L'hypothèse qui intervient dans le Théorème 2.2 en dimensions $d = 4$ et $d = 3$ consiste à supposer une borne du type $\gamma_{N,4} \leq C^N$ et $\gamma_{N,3} \leq C^N$ pour une certaine constante C . Pour terminer, nous souhaitons mentionner qu'un résultat semblable à (ii) a déjà été démontré, par des méthodes différentes, dans [Lab].

2- Le résultat (2.24) est bien connu ([Gr], [Va]) et donne la répartition radiale des carrés de vecteurs entiers. Le résultat (2.23) est plus délicat et fournit également la répartition angulaire des vecteurs entiers de norme donnée.

3- La contrainte $k_0^2 = \dots = k_N^2$ dans la somme de Riemann intervenant dans l'équation (2.21) entraîne que l'on considère ici une somme discrète échantillonnée sur une sous-variété de codimension N de l'espace $\mathbb{R}^{(N+1)d}$. D'un point de vue naïf, on s'attendrait donc plutôt à une pondération par $1/L^{d+N(d-1)}$ (plutôt que $1/L^{d+N(d-2)}$) de la somme. On voit que l'effet d'échantillonnage discret a un effet non-trivial sur la convergence de la somme de Riemann (2.21) dès lors qu'elle est posée sur une variété qui possède de la courbure, et que les considérations arithmétiques gouvernent complètement la limite. Notons à ce propos que, pour une sous-variété générale, on ne peut trouver *a priori aucun* vecteur entier appartenant à cette sous-variété.

Esquisse de preuve des Théorèmes 2.2 et 2.3

Première étape

Le point (i) du Théorème 2.3 s'obtient comme une conséquence du point (ii), joint à quelques considérations sur le comportement moyen de la série singulière $\mathfrak{S}(L^2)$ lorsque

$L \rightarrow \infty$. La preuve du point (ii) repose sur l'idée suivante : si l'on “oublie” la contrainte angulaire $n/L \in \Omega$, l'asymptotique du cardinal $\#\{n \in \mathbb{Z}^d \text{ tels que } n^2 = L^2\}$ lorsque $L \rightarrow \infty$ est bien connue ([Gr]). Elle se calcule en faisant appel à la méthode du cercle introduite par Hardy et Littlewood ([Va]). Celle-ci peut s'adapter de manière naturelle pour intégrer la contrainte angulaire $n/L \in \Omega$. Le cas des dimensions $d \geq 5$ s'obtient alors assez directement. C'est le cas des dimensions $d = 4$ et $d = 3$ qui amène des difficultés analytiques sérieuses. Celles-ci sont dues au défaut de convergence absolue de la série singulière \mathfrak{S} pour les valeurs $d = 3$ et $d = 4$. Pour ces dimensions, on remédie aux difficultés mentionnées en considérant, non pas directement l'asymptotique du terme de gauche de (2.23), mais l'asymptotique de certaines “moyennes” de tels termes. Nous renvoyons à [12] pour les preuves et énoncés précis.

Deuxième étape

Nous en venons à la preuve du Théorème 2.2 (nous renvoyons à [11] pour les preuves précises). Dans l'esprit de la démonstration du Théorème 2.1 ci-dessus (voir aussi remarque 2.3), l'établissement du Théorème 2.2 repose en premier lieu sur la résolution de l'équation (2.8) par une méthode itérative. Dans le cas présent, on calcule d'abord explicitement $\rho(t, n, p)$ en fonction de la donnée initiale $\rho(0, n, p)$. Ceci permet d'emblée d'exprimer $\rho_I(t, \mathbf{n}, \mathbf{p})$ en fonction de ρ^0 , comme un développement en série convergent en puissances de \widehat{V} . On cherche alors à passer directement à la limite (terme à terme) dans ce développement.

Pour ce faire, on est naturellement amené à étudier la convergence, dans le régime (2.19), de termes dont la forme typique est,

$$\frac{1}{L^{d+(d-2)}} \sum_{(n,p) \in \mathbb{Z}^{2d}} \int_{s=0}^t \exp\left(i \frac{T}{L^2} [n^2 - p^2] s\right) \Phi\left(\frac{n}{L}, \frac{p}{L}\right) ds, \quad (2.26)$$

pour une fonction test $\Phi(\mathbf{n}, \mathbf{p})$ régulière et à support compact. Le point important est que cette “somme de Riemann” est a priori incorrectement normalisée en L (le préfacteur attendu est $1/L^{2d}$ au lieu de $1/L^{d+(d-2)}$). Néanmoins, nous prouvons ci-dessous la convergence du terme (2.26), ce qui montre que la normalisation $1/L^{d+(d-2)}$ est la bonne.

Pour traiter l'asymptotique de (2.26), il est naturel de distinguer une contribution non résonnante, liée aux entiers n et p tels que $n^2 \neq p^2$, et une contribution résonnante pour laquelle $n^2 = p^2$, ce que nous faisons maintenant.

Deuxième étape - a : Le terme non-résonnant

On montre ci-dessous la borne,

$$\begin{aligned} I &:= \left| \frac{1}{L^{d+(d-2)}} \sum_{n^2 \neq p^2} \int_{s=0}^t \exp\left(i \frac{T}{L^2} [n^2 - p^2] s\right) \Phi\left(\frac{n}{L}, \frac{p}{L}\right) ds \right| \\ &\leq C(\Phi, \varepsilon) \frac{L^{2+\varepsilon} \ln L}{T}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

pour une constante $C(\Phi, \varepsilon)$ qui dépend de Φ et de ε , où $\varepsilon > 0$ est arbitrairement petit (on peut en fait prendre $\varepsilon = 0$ en dimension $d \geq 5$). En effet, en décomposant la somme $\sum_{n^2 \neq p^2}$ suivant les valeurs de $\omega := n^2 - p^2 \in \mathbb{Z}^*$, on obtient facilement,

$$I \leq \frac{1}{L^{d+(d-2)}} \sum_{\omega \in \mathbb{Z}^*} \left| \int_{s=0}^t \exp\left(i \frac{T}{L^2} \omega s\right) \sum_{n^2 - p^2 = \omega} \Phi\left(\frac{n}{L}, \frac{p}{L}\right) ds \right|,$$

et donc, après calcul explicite de l'intégrale dans la variable s ,

$$I \leq \frac{CL^2}{T L^{d+(d-2)}} \sum_{\omega \in \mathbb{Z}^*} \frac{1}{|\omega|} \sum_{n^2 - p^2 = \omega} \left| \Phi \left(\frac{n}{L}, \frac{p}{L} \right) \right|,$$

pour une constante C . Maintenant, on utilise que Φ a un support compact, de sorte que la somme ci-dessus est restreinte aux valeurs $|\omega| \leq C(\Phi)L^2$, et $n^2 \leq C(\Phi)L^2$. On obtient,

$$I \leq C(\Phi) \frac{L^2}{T L^{d+(d-2)}} \sum_{1 \leq |\omega| \leq L^2} \frac{1}{|\omega|} \#\{(n, p) \in \mathbb{Z}^d \text{ t.q. } n^2 \leq L^2, p^2 = n^2 - \omega\}. \quad (2.28)$$

On utilise alors le résultat fondamental (voir [Gr]),

$$\#\{p^2 = n^2 - \omega\} \leq C(\varepsilon)(n^2 - \omega)^{\frac{d}{2}-1+\varepsilon}, \quad (2.29)$$

valable pour tout $\varepsilon > 0$, et pour toute dimension $d \geq 3$ (et on peut prendre $\varepsilon = 0$ lorsque $d \geq 5$). Au vu de l'information $|\omega| \leq L^2$ et $n^2 \leq L^2$, on obtient donc,

$$\#\{p^2 = n^2 - \omega\} \leq C(\varepsilon)L^{d-2+\varepsilon},$$

la puissance L^{d-2} étant la raison pour la normalisation en L utilisée dans (2.26). Ceci donne,

$$\begin{aligned} I &\leq \frac{C(\Phi, \varepsilon)L^2}{T L^{d+(d-2)}} \sum_{1 \leq |\omega| \leq L^2} \frac{1}{|\omega|} \times L^d \times L^{d-2+\varepsilon} \\ &\leq C(\Phi, \varepsilon) \frac{L^{2+\varepsilon} \ln L}{T} \rightarrow 0, \end{aligned}$$

grâce à (2.19), et (2.27) est démontrée. Notons que le facteur $\ln L$ dans (2.27) est relié à la divergence logarithmique de la série harmonique.

Remarque 2.6 Nous utilisons ici fortement le fait que la différence $n^2 - p^2$ appartient à \mathbb{Z} , de sorte que nous n'avons pas de problème de "petits diviseurs". Si nous partons d'un tore général $\prod_{j=1}^d [-\lambda_j L, +\lambda_j L]$ pour certains $\lambda_j > 0$ (au lieu du tore $[-\pi L, \pi L]^d$), la relation $\omega = n^2 - p^2 = \sum_{j=1}^d (n_j^2 - p_j^2)$ devient $\omega = \sum_{j=1}^d \mu_j (n_j^2 - p_j^2)$ pour certains coefficients $\mu_j > 0$, et on ne peut plus utiliser l'implication $\omega \neq 0 \implies |\omega| \geq 1$. En particulier notre méthode tombe en défaut dans ce dernier cas.

Deuxième étape - b : Le terme résonnant

On a donc montré que la contribution non-résonnante du terme typique (2.26) tend vers 0. Il reste à étudier le terme résonnant, qui est défini comme,

$$II := \frac{t}{L^{d+(d-2)}} \sum_{n^2=p^2} \Phi \left(\frac{n}{L}, \frac{p}{L} \right). \quad (2.30)$$

Ce type de somme avec contrainte quadratique est précisément pris en compte dans le Théorème 2.3, et l'on obtient le Théorème 2.2 comme une conséquence du Théorème 2.3.

Terminons en mentionnant au passage que, en dimension $d \geq 5$, il est très aisé de montrer que le terme (2.30) est borné, en utilisant la borne bien connue ([Gr]),

$$\#\{n \in \mathbb{Z}^d \text{ t.q. } n^2 = L^2\} \leq CL^{d-2}. \quad (2.31)$$

Le calcul de la limite du terme (2.30) est même possible lorsque Φ ne dépend que de n^2/L^2 et p^2/L^2 , en utilisant uniquement l'asymptotique (2.24). Lorsque Φ dépend aussi des variables angulaires $n/|n|$ et $p/|p|$, le calcul est plus délicat et nécessite vraiment l'usage de l'information plus précise (2.23). \square

2.3.3 Introduction d'un paramètre d'amortissement $\alpha > 0$; limite simultanée $T \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$, suivie de la limite $\alpha \rightarrow 0$ ([8], [9], [10])

Les paragraphes 2.3.1 et 2.3.2 ci-dessus considèrent des limites temps long/potentiel petit dans l'équation de Von Neumann périodique (2.8). Contrairement aux considérations formelles du paragraphe 2.1, aucune de ces deux limites ne fournit une dynamique asymptotique décrite par une équation de type Boltzmann (2.2). En particulier, le passage à la limite $L \rightarrow \infty$ n' "améliore pas" la convergence, et les effets liés au spectre discret dominant anormalement la dynamique tant dans le cas du paragraphe 2.3.1 ($L \equiv 1$) que dans le cas du paragraphe 2.3.2 ($L \rightarrow \infty$).

Pour cette raison, nous passons maintenant à la limite dans une forme *modifiée* de l'équation de Von Neumann périodique (2.8). Suivant un procédé standard en physique statistique, on se place en effet dans un cas où le système {électron + obstacles} interagit de plus avec un bain extérieur de particules, et l'on va passer à la limite sur la dynamique de l'électron ainsi modifiée. Nous renvoyons à [Hu] sur la nécessité physique de considérer de telles dynamiques modifiées, mais aussi à [Sp2,3], [JP], [14], ou encore [Dü], par exemple, pour des modèles dans le même esprit.

Dans le cas qui nous intéresse, on suppose donc que le système {électron + obstacles} décrit par (2.8) interagit de plus avec un bain extérieur de photons. Suivant [NM], [SSL], [Boy], [Lo], une telle interaction induit une décroissance en temps de la partie diagonale comme de la partie extra-diagonale de la matrice densité ρ , mais la décroissance est beaucoup plus rapide pour les termes extra-diagonaux. Un tel comportement peut être pris en compte de manière phénoménologique, quitte à introduire comme dans [SSL], [NM], ..., un modèle simplifié où l'on force la décroissance exponentielle des seuls termes extra-diagonaux. En d'autres termes, on se donne un paramètre $\alpha > 0$, et l'on considère l'équation,

$$\begin{aligned} \frac{i}{T} \partial_t \rho(t, n, p) &= \frac{p^2 - n^2}{L^2} \rho(t, n, p) - i\alpha \rho(t, n, p) \mathbf{1}[n \neq p] \\ &+ \frac{\lambda}{L^d} \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \left[\widehat{V} \left(\frac{n-k}{L} \right) \rho(t, k, p) - \widehat{V} \left(\frac{k-p}{L} \right) \rho(t, n, k) \right], \end{aligned} \quad (2.32)$$

avec donnée initiale (2.9). C'est maintenant sur cette forme modifiée de l'équation de Von Neumann périodique que l'on cherche à passer à la limite.

Avec ce point de vue, toute limite du type $T \rightarrow \infty$ dans (2.32) est triviale tant que l'on maintient $L \equiv 1$ comme dans le paragraphe 2.3.1. Nous considérons donc d'emblée le cas où $L \rightarrow \infty$. L'analyse montre que le régime mathématique naturel dans le présent cadre

coïncide exactement avec le régime faible densité prévu par la physique. On considère en effet l'asymptotique,

$$T = L^d, \lambda = 1, L \rightarrow \infty, \quad (2.33)$$

dans (2.32).

Notre résultat principal est le suivant ([9], [10], voir [8] pour l'annonce d'un résultat plus faible, qui n'aborde, en particulier, pas le point (iii) ci-dessous),

Théorème 2.4 *Soit $\rho(t, n, p)$ la solution de (2.32) avec donnée initiale (2.9). On suppose $d \geq 3$. On considère la distribution,*

$$\tilde{f}(t, \mathbf{n}) := \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} \rho(t, n, n) \delta \left(\mathbf{n} - \frac{n}{L} \right), \quad (2.34)$$

Alors,

(i) ([9]) la limite suivante existe au sens des distributions,

$$f(t, \mathbf{n}) := \lim_{\alpha \rightarrow 0} \lim_{T, L \rightarrow \infty} \tilde{f}(t, \mathbf{n}), \quad (2.35)$$

avec la convention que le second symbole $\lim_{T, L \rightarrow \infty}$ désigne la limite prise dans l'asymptotique (2.33).

(ii) ([9]) la distribution $f(t, \mathbf{n})$ satisfait une équation de Boltzmann,

$$\partial_t f(t, \mathbf{n}) = \int_{\mathbb{R}^d} [\Sigma(\mathbf{n}, \mathbf{k}) f(t, \mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, \mathbf{n}) f(t, \mathbf{n})] d\mathbf{k}, \quad (2.36)$$

où la section efficace Σ est donnée comme un développement en série convergent en puissances de \hat{V} .

(iii) ([10]) la section efficace Σ obtenue dans (2.36) coïncide avec la section efficace prévue par la physique, dans le sens où,

$$\Sigma(\mathbf{n}, \mathbf{k}) \equiv \Sigma^{\text{ld}}(\mathbf{n}, \mathbf{k}), \quad (2.37)$$

et Σ^{ld} est défini en (2.3) via la série de Born.

La preuve du Théorème 2.4 est longue, nous en esquissons les grandes lignes plus bas. En particulier, la démonstration du point (iii) qui identifie la section efficace obtenue en (ii) comme la “bonne” section efficace, est un point délicat. Nous souhaitons insister sur le fait que le présent travail montre qu’une équation de Von Neumann convenablement mise à l’échelle converge vers une équation de Boltzmann avec section efficace donnée par la série de Born complète définissant Σ^{ld} (voir (2.3) - voir [Dü] pour un résultat comparable). De très nombreux travaux dans ce contexte se restreignent en effet à des régimes faible couplage, où seule la section efficace Σ^{wc} (voir (2.6)), c’est-à-dire le premier terme de la série de Born, est obtenue. Nous soulignons aussi qu’un argument clé dans l’établissement du Théorème 2.4 réside dans la définition de certaines distributions, et surtout certains produits de distributions, comme intégrales oscillantes. C’est l’objet du Lemme 2.1 ci-dessous.

Esquisse de preuve du Théorème 2.4

Première étape : obtention de bornes a priori

On commence par montrer ([9]) que le terme additionnel d'amortissement dans (2.32) satisfait la propriété de Lindblad ([Li]). Celle-ci implique que la positivité de la matrice densité en tant qu'opérateur est préservée par l'évolution temporelle. De cela, on déduit la borne L^∞ suivante,

$$\|\rho(t, n, n)\|_{l^\infty(\mathbb{Z}^d)} \leq \frac{C}{L^d}, \quad (2.38)$$

et d'autres bornes du même type. Cette borne est cruciale pour la suite, et nous insistons sur le fait que de telles bornes L^∞ ne sont pas du tout conventionnelles dans le cadre de l'équation de Schrödinger.

Deuxième étape: passage à la limite $L, T \rightarrow \infty$ et "perte de mémoire"

Comme dans la preuve du Théorème 2.1 (voir remarque 2.3), on commence par calculer, par un procédé itératif, la valeur explicite des coefficients non diagonaux $\rho(t, n, p)$ ($n \neq p$) en fonction des coefficients diagonaux $\rho(t, n, n)$. On reporte alors cette valeur dans l'équation donnant l'évolution de $\rho(t, n, n)$ (voir (2.16), (2.17)). On obtient,

$$\begin{aligned} \partial_t \rho(t, n, n) = & 2\text{Re} \left[\int_0^{L^d t} \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \exp \left(i \frac{n^2 - p^2}{L^2} s - \alpha s \right) \right. \\ & \left. \left| \widehat{V} \left(\frac{n-k}{L} \right) \right|^2 \left[\rho \left(t - \frac{s}{L^d}, k, k \right) - \rho \left(t - \frac{s}{L^d}, n, n \right) \right] ds \right] \\ & + O(\widehat{V}^3), \end{aligned} \quad (2.39)$$

où le terme $O(\widehat{V}^3)$ cache un développement en série convergent en puissances de \widehat{V} (sa valeur explicite est donnée dans [9]). L'information (2.38) permet dès lors, pour l'essentiel, de passer à la limite dans (2.39) comme dans une somme de Riemann. La difficulté principale provient du fait que le développement en série caché dans le terme $O(\widehat{V}^3)$ de (2.39), fait intervenir certaines sommes d'exponentielles complexes fortement oscillantes. Il est possible de contrôler la taille des termes correspondants *dans le cas de variables n, k , continues* (voir le Lemme 2.1 plus bas), grâce aux intégrales oscillantes, et de faire converger le développement en série sous-jacent. En revanche, dans le présent cas de variables discrètes, un tel contrôle n'est pas possible, et un procédé alternatif est nécessaire.

On obtient ainsi pour $t \geq 0$,

$$\begin{aligned} \partial_t \widetilde{f}(t, \mathbf{n}) = & \\ & 2\text{Re} \left(\int_0^{+\infty} ds \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2]s - \alpha s \right) \left| \widehat{V}(\mathbf{n} - \mathbf{k}) \right|^2 [\widetilde{f}(t, \mathbf{k}) - \widetilde{f}(t, \mathbf{n})] d\mathbf{k} \right) \\ & + O(\widehat{V}^3), \end{aligned} \quad (2.40)$$

où le terme $O(\widehat{V}^3)$ cache un nouveau développement en série convergent en puissances de \widehat{V} , que nous n'écrivons pas (encore une fois, sa valeur explicite est donnée dans [9]). Le point important ici réside dans le fait que la limite $L, T \rightarrow \infty$ permet de passer de l'équation (2.39), qui présente un effet de mémoire en temps, à l'équation (2.40) qui est

cette fois ponctuelle en temps. C'est bien sûr crucial au regard, par exemple, de la situation décrite par le Théorème 2.1 ci-dessus.

Troisième étape : passage à la limite $\alpha \rightarrow 0$, et obtention d'intégrales oscillantes

Au vu de (2.40), la limite $\alpha \rightarrow 0$ nous amène à écrire l'égalité suivante, valable au sens des distributions sur $\mathbb{R}_{\mathbf{n}}^d \times \mathbb{R}_{\mathbf{k}}^d$,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} \exp(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2]s - \alpha s) ds = \int_0^{+\infty} \exp(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2]s) ds. \quad (2.41)$$

Pour cette raison, nous définissons la distribution,

$$\Delta(\mathbf{n}, \mathbf{k}) := \int_0^{+\infty} \exp(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2]s) ds. \quad (2.42)$$

Cette distribution est bien définie en tant qu'intégrale oscillante pour les dimensions $d \geq 3$ (d'où la restriction $d \geq 3$ dans l'énoncé du Théorème 2.4), et les théorèmes usuels de composition des distributions [Hö1] fournissent même l'égalité,

$$\Delta(\mathbf{n}, \mathbf{k}) = \pi \delta(\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2) + ipv \left(\frac{1}{\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2} \right), \quad (2.43)$$

où δ est la masse de Dirac et pv désigne la valeur principale.

On est dès lors tenté d'écrire après passage à la limite $\alpha \rightarrow 0$ dans (2.40) (la valeur principale disparaît en raison du facteur i et de la partie réelle),

$$\partial_t f(t, \mathbf{n}) = 2\pi \int_{\mathbb{R}^d} \delta(\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2) \left| \widehat{V}(\mathbf{n} - \mathbf{k}) \right|^2 [f(t, \mathbf{k}) - f(t, \mathbf{n})] d\mathbf{k} + O(\widehat{V}^3). \quad (2.44)$$

Grâce à (2.41)-(2.43), il est en fait facile de justifier (2.44) pour le terme de plus bas ordre en \widehat{V} . Pour établir rigoureusement (2.44), toute la difficulté réside dans le traitement des termes d'ordre supérieur, c'est-à-dire du terme en $O(\widehat{V}^3)$ que nous n'avons pas écrit jusqu'à présent. Tous calculs faits, la justification du passage à la limite faible $\alpha \rightarrow 0$ dans (2.40) se ramène plus ou moins à donner un sens mathématique à la série suivante,

$$\sum_{l \in \mathbb{N}^*} \sum_{s=1}^{l-1} \int_{\mathbb{R}^{ld}} \Delta(\mathbf{n}, \mathbf{k}_1) \cdots \Delta(\mathbf{n}, \mathbf{k}_s) \Delta(\mathbf{k}_{s+1}, \mathbf{n}) \cdots \Delta(\mathbf{k}_l, \mathbf{n}) \widehat{V}(\mathbf{n} - \mathbf{k}_1) \widehat{V}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdots \widehat{V}(\mathbf{k}_l - \mathbf{n}) \phi(\mathbf{n}) d\mathbf{n} d\mathbf{k}_1 \cdots d\mathbf{k}_l, \quad (2.45)$$

pour une fonction test régulière ϕ . La difficulté est double. Il s'agit d'abord de définir certains *produits* des distributions $\Delta(\mathbf{n}, \mathbf{k}_i)$, $\Delta(\mathbf{k}_i, \mathbf{n})$, entre elles. Dans le cas présent, la singularité du produit $\Delta(\mathbf{n}, \mathbf{k}_1) \cdots \Delta(\mathbf{n}, \mathbf{k}_s) \Delta(\mathbf{k}_{s+1}, \mathbf{n}) \cdots \Delta(\mathbf{k}_l, \mathbf{n})$, est trop forte, et l'on ne peut pas définir celui-ci par simple application des théorèmes usuels de multiplication/composition de distributions dont le front d'onde satisfait certaines propriétés géométriques [Hö1]. Deuxièmement, il s'agit de contrôler la dépendance en l de chaque terme de la série (2.45), de manière à assurer la convergence de celle-ci.

La difficulté est levée en considérant le produit de distributions $\Delta(.,.)$ dans (2.45) comme une intégrale oscillante. On utilise en particulier que la distribution $\exp(is\mathbf{n}^2)$ sur $\mathbb{R}_{\mathbf{n}}^d$ est (faiblement) de taille $s^{-d/2}$ pour les grandes valeurs de s . On parvient alors à obtenir le Lemme suivant (voir [9] pour une version plus générale),

Lemme 2.1 Soit $l \in \mathbb{N}$, $l \geq 1$. Soient $\mathbf{m}, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l$ appartenant à \mathbb{R}^d . Soit $1 \leq s \leq l-1$. On suppose $d \geq 3$. Alors,

(i) la distribution suivante est bien définie sur $\mathbb{R}^{(l+1)d}$,

$$\Delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{m}) \cdots \Delta(\mathbf{k}_s, \mathbf{m}) \Delta(\mathbf{m}, \mathbf{k}_{s+1}) \cdots \Delta(\mathbf{m}, \mathbf{k}_l) . \quad (2.46)$$

Plus précisément, pour tout $D \geq d+1$, il existe une constante $C(D)$ telle que le produit de dualité de la distribution (2.46) avec une fonction test $\phi(\mathbf{m}, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l)$ est borné par,

$$C(D)^l \sup_{|\gamma| \leq D} \sup_i \|(1 + \mathbf{k}_i^2)^{D/2} \partial_{\mathbf{k}_i}^\gamma \phi\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{(l+1)d})} . \quad (2.47)$$

(ii) Soit $\alpha > 0$. On pose,

$$\Delta_\alpha(\mathbf{n}, \mathbf{p}) := \int_0^{+\infty} \exp(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{p}^2]s - \alpha s) ds . \quad (2.48)$$

Alors la limite faible suivante a lieu, quitte à tester chaque membre de (2.49) contre une fonction test ϕ comme ci-dessus,

$$\begin{aligned} & \lim_{\alpha \rightarrow 0} \Delta_\alpha(\mathbf{k}_1, \mathbf{m}) \cdots \Delta_\alpha(\mathbf{k}_s, \mathbf{m}) \Delta_\alpha(\mathbf{m}, \mathbf{k}_{s+1}) \cdots \Delta_\alpha(\mathbf{m}, \mathbf{k}_l) \\ & = \Delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{m}) \cdots \Delta(\mathbf{k}_s, \mathbf{m}) \Delta(\mathbf{m}, \mathbf{k}_{s+1}) \cdots \Delta(\mathbf{m}, \mathbf{k}_l) . \end{aligned} \quad (2.49)$$

Le Lemme 2.1 permet immédiatement de borner terme à terme (2.45) par,

$$\sum_{l \in \mathbb{N}^*} C(d)^l \|\widehat{V}\|^{l+1} \|\phi\| , \quad (2.50)$$

pour une constante $C(d)$ qui ne dépend que de la dimension $d \geq 3$, et pour une norme $\|\cdot\|$ qui fait intervenir la norme L^∞ d'une quantité fixe de moments et de dérivées de \widehat{V} et ϕ .

Cette troisième étape permet d'établir la convergence de (2.40) vers (2.44) lorsque $\alpha \rightarrow 0$, et la preuve des points (i) et (ii) du Théorème 2.4 est obtenue.

Quatrième étape : identification de la section efficace

A ce stade du raisonnement, la section efficace Σ obtenue dans (2.36) est donnée par un développement en série convergent en puissances de \widehat{V} , qui fait apparaître certains produits et combinaisons des distributions $\Delta(\cdot, \cdot)$ déjà manipulées plus haut. Le lien entre ce développement et la série de Born est loin d'être évident.

On fait alors ([10]) l'observation clé que certains termes dans le développement obtenu s'annulent ou se compensent deux à deux. Ceci repose sur l'identité algébrique,

$$\Delta(\mathbf{n}, \mathbf{p})[\Delta(\mathbf{n}, \mathbf{m}) + \Delta(\mathbf{m}, \mathbf{p})] = \Delta(\mathbf{n}, \mathbf{m})\Delta(\mathbf{m}, \mathbf{p}) . \quad (2.51)$$

En utilisant convenablement (2.51), on établit une chaîne d'égalités qui donnent *in fine* l'égalité terme à terme entre la série définissant Σ dans (2.36) et la série de Born. \square

2.3.4 Conclusion sur les trois limites précédentes : comportement de certaines sommes discrètes oscillantes

Nous souhaitons pour conclure souligner ici un point technique clé qui nous semble expliquer de manière assez convaincante (quoique simpliste) le mécanisme mathématique élémentaire à la base des trois limites différentes obtenues dans les paragraphes 2.3.1, 2.3.2, et 2.3.3 ci-dessus.

Au vu de (2.17), (2.26), et enfin (2.39), (2.40), (2.44), nous pouvons en effet, pour caricaturer, dire que les trois limites étudiées plus haut s'appuient sur le comportement suivant de certaines "sommés discrètes oscillantes" (ici ϕ est une fonction test suffisamment régulière) :

- Le paragraphe 2.3.1 repose sur la limite suivante,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{(n,k) \in \mathbb{Z}^{2d}} \int_0^t \exp(iT[n^2 - k^2]s) \phi(n, k) ds = t \sum_{n,k \in \mathbb{Z}^d} \mathbf{1}[n^2 = k^2] \phi(n, k). \quad (2.52)$$

C'est le Lemme de Riemann Lebesgue.

- Le paragraphe 2.3.2 repose en revanche sur la limite typique suivante,

$$\begin{aligned} & \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^{2d+(d-2)}} \sum_{n,k \in \mathbb{Z}^d} \int_0^{L^d t} \exp\left(i \frac{n^2 - k^2}{L^2} s\right) \phi\left(\frac{n}{L}, \frac{k}{L}\right) ds \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{t}{L^{d+(d-2)}} \sum_{(n,k) \in \mathbb{Z}^{2d}} \mathbf{1}[n^2 = k^2] \phi\left(\frac{n}{L}, \frac{k}{L}\right) \\ &= t \gamma_{1,d} \int_0^{+\infty} \int_{(\mathbb{S}^{d-1})^2} r^{2d-3} \phi(r\mathbf{n}, r\mathbf{k}) dr d\sigma(\mathbf{n}) d\sigma(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (2.53)$$

la dernière égalité ressortant du Théorème 2.3. La première égalité découle de l'esquisse de preuve fournie au paragraphe 2.3.2, quitte à spécifier la preuve au cas $T = L^d$ (compatible avec l'asymptotique (2.19)).

- Enfin, le paragraphe 2.3.3 repose sur la limite typique suivante,

$$\begin{aligned} & \lim_{\alpha \rightarrow 0} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^{2d}} \sum_{n,k \in \mathbb{Z}^d} \int_0^{L^d t} \exp\left(i \frac{n^2 - k^2}{L^2} s - \alpha s\right) \phi\left(\frac{n}{L}, \frac{k}{L}\right) ds \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \exp\left(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2]s - \alpha s\right) \phi(\mathbf{n}, \mathbf{k}) ds d\mathbf{n} d\mathbf{k} \\ &= \int_0^{+\infty} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \exp\left(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}^2]s\right) \phi(\mathbf{n}, \mathbf{k}) ds d\mathbf{n} d\mathbf{k}, \end{aligned} \quad (2.54)$$

cette dernière intégrale ayant un sens en tant qu'intégrale oscillante.

3 L'équation de Fokker-Planck comme limite de systèmes quantiques réversibles

3.1 Le Hamiltonien de Caldeira et Leggett

Dans [CL1], A.O. Caldeira et A.J. Leggett introduisent le Hamiltonien suivant,

$$\begin{aligned} H &= H_E + H_R + \lambda H_I \\ &= \left(-\Delta_x + V(x) \right) + \left(\sum_{j=1}^{N\Omega} \left[-\Delta_{R_j} + \omega_j^2 \frac{R_j^2}{2} \right] \right) + \lambda \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N\Omega} [\omega_j R_j \cdot x] \right). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Le premier terme H_E de (3.1) représente le Hamiltonien d'une particule test, disons un électron, de position $x \in \mathbb{R}^d$, et soumise à l'influence du potentiel extérieur V (le terme $-\Delta_x$ désigne le Laplacien dans la variable x). On suppose que le potentiel V confine l'électron dans une région fixe de l'espace. Pour la clarté de l'exposé, et sans perte de généralité (voir paragraphe 3.2 ci-dessous) on se place d'emblée, et pour toute la suite de cette section 3, dans l'hypothèse où V dans (3.1) est choisi *harmonique*, c'est-à-dire,

$$V(x) = \frac{x^2}{2}. \quad (3.2)$$

(voir remarque 3.2 sur ce point). Nous nous restreignons aussi au cas $d = 1$ dans toute la suite, là encore sans perte de généralité.

Le second terme H_R modélise un réservoir constitué d'un grand nombre (entier), $N\Omega$, d'oscillateurs harmoniques. Ceux-ci sont représentés dans leurs variables dites "normales", $R_j \in \mathbb{R}^d$ (voir [Re]), et possèdent les pulsations respectives ω_j ($j \in \llbracket 1, N\Omega \rrbracket$). On suppose $\omega_j \in [0, \Omega]$. Ici, Ω représente donc la fréquence maximale des oscillateurs, et N est le nombre d'oscillateurs par unité de fréquence. Le cas typique est celui d'une répartition uniforme en fréquence,

$$\omega_j = \frac{j}{N}, \quad j \in \llbracket 1, N\Omega \rrbracket, \quad (3.3)$$

cas auquel nous nous cantonnerons dans tout le paragraphe 3 (voir sur ce point la remarque 3.1, point 7). Un Hamiltonien tel que H_R modélise naturellement un système de phonons ([Re]), c'est-à-dire tout simplement un réseau cristallin constitué de N atomes, couplés entre eux de manière harmonique. On peut aussi penser à H_R comme associé à un système de photons ([CTDRG]) : dans ce cas il modélise un rayonnement électromagnétique, et le paramètre Ω correspond à une troncature dans l'ultraviolet.

Le troisième et dernier terme λH_I représente l'interaction entre l'électron et le réservoir, et la constante de couplage $\lambda \in \mathbb{R}$ en mesure l'intensité. C'est ce terme qui contient les hypothèses et restrictions essentielles dans la modélisation proposée par [CL1]. Le point clé réside dans le fait que l'interaction est ici supposée *linéaire*, c'est-à-dire qu'elle se présente sous la forme d'une somme de termes en $R_j \cdot x$. Une telle hypothèse repose implicitement sur une linéarisation dans un terme de couplage plus réaliste : si l'on pense au réservoir d'oscillateurs comme associé à des phonons, on aura supposé que l'électron reste dans l'immédiat voisinage d'un atome fixe du réseau atomique sous-jacent, et avec lequel on peut donc supposer qu'il interagit de manière exclusive (on aura donc négligé l'influence des

autres atomes) ; si l'on pense en revanche à un couplage avec des photons, on aura supposé de même que l'électron évolue dans une région fixe et petite de l'espace, où le champ électromagnétique sous-jacent peut être considéré comme approximativement constant. Toutes ces hypothèses simplificatrices conduisent en effet à un terme d'interaction H_I comme dans (3.1). Mentionnons pour terminer que la normalisation en $N^{-1/2}$ du terme d'interaction qui apparaît dans (3.1), est naturelle, comme nous l'expliquons un peu plus bas.

Fortement inspirés par les travaux de Feynman, Hibbs, et Vernon ([FH], [FV]), Caldeira et Leggett considèrent dans [CL1] la dynamique quantique naturellement associée au Hamiltonien H pour le système {électron + oscillateurs}. Ils se placent dans l'hypothèse où le système est initialement à l'équilibre thermodynamique à la température inverse $\beta > 0$, pour le Hamiltonien "sans interaction" $H_E + H_R$, c'est-à-dire que la matrice densité initiale du système vaut,

$$\exp(-\beta [H_E + H_R]) . \quad (3.4)$$

L'hypothèse (3.4) est très classique, elle signifie que l'on s'intéresse à l'effet dynamique de la perturbation λH_I , sur un état initial qui est un équilibre de l'Hamiltonien $H_E + H_R$. On renvoie par exemple à (2.9) pour une hypothèse semblable, dans un contexte différent.

Ils posent dès lors la question (naturelle, voir [FV], ou encore [Sp2,3] pour des considérations plus mathématiques) de décrire la dynamique de l'électron *seul*, c'est-à-dire lorsque l'état du réservoir est considéré comme un paramètre, par rapport auquel on procède à une intégration - voir plus bas (3.8) pour le sens précis. Avant tout passage à la limite, celle-ci est bien entendu réversible en temps. A ce niveau de la modélisation, elle dépend de 4 paramètres d'échelle : d'une part le nombre d'oscillateurs N , que l'on souhaite faire tendre vers l'infini comme il est naturel dans ce contexte ([Sp2,3]), d'autre part la constante de couplage λ , et enfin la température inverse β et le paramètre de troncature dans l'ultra-violet Ω , qui jouent un rôle particulier.

Décrivons d'abord, de manière très simplifiée, le comportement qualitatif du modèle. En l'absence d'interaction ($\lambda = 0$), l'électron suit un mouvement d'oscillateur harmonique à la pulsation 1, à côté d'un réservoir constitué de N oscillateurs, indexés par j , et de pulsations respectives ω_j . L'hypothèse (3.4) sur l'état initial, jointe au fait que l'on s'intéresse à l'évolution de l'électron *seul*, signifie que les photons/phonons présentent, au moins initialement, certaines "fluctuations", et les variables R_j décrivant l'état du réservoir peuvent naturellement être vues, à l'instant initial, comme $N\Omega$ variables aléatoires Gaussiennes, centrées. Lorsque l'on met en place l'interaction ($\lambda \neq 0$), le système de photons/phonons influe sur la dynamique de l'électron (proportionnellement aux R_j), et réciproquement. Toutefois, dans la limite où N est grand, l'influence de l'électron sur le réservoir est négligeable, et seule l'interaction inverse compte. De plus, un calcul simple montre que chaque oscillateur se trouve exercer sur l'électron une force approximativement proportionnelle à $\lambda \omega_j R_j x \cos(\omega_j t) / \sqrt{\beta N}$, et ici encore, R_j est vue comme une variable aléatoire normale centrée. Ainsi, le système de N oscillateur exerce une force cumulée $F_N(t) \sim \sum_{j=1}^{N\Omega} \lambda \omega_j R_j x \cos(\omega_j t) / \sqrt{\beta N}$. Celle-ci présente de très fortes "fluctuations", dues tant au caractère aléatoire des variables R_j qu'aux fortes oscillations des fonctions $\cos(\omega_j t)$. De plus, $F_N(t)$ se trouve être de taille λ^2 / β (grâce au Théorème Central Limite, par exemple). Pour cette raison, la dynamique de l'électron, en présence du couplage, est la

superposition d'un mouvement basique d'oscillation à la pulsation 1, et de "fluctuations" dues au terme de forçage $F_N(t)$.

Partant de là, l'analyse proposée dans [CL1] repose sur l'idée suivante : dans la limite où les "fluctuations" de l'électron sont suffisamment "fortes", un phénomène de diffusion vient s'ajouter à ses oscillations de période 2π . Pour cette raison, le travail [CL1] repose de manière cruciale sur une double limite $\beta \rightarrow 0$ (la température du réservoir tend vers l'infini), et $\Omega \rightarrow \infty$ (on enlève la troncature dans l'ultra-violet). Pour simplifier à outrance, cette analyse rend le terme de forçage $F_N(t)$ mentionné ci-dessus égal à $F(t) \sim (\lambda/\sqrt{\beta}) \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{N\Omega} \omega_j R_j x \cos(\omega_j t) / \sqrt{N}$, c'est-à-dire à $F(t) \sim (\lambda/\sqrt{\beta}) x dW(t)$, où $dW(t)$ est le bruit blanc. On trouve dans [CL1] une justification formelle de toutes ces assertions, basée sur un usage systématique des intégrales de Feynman. La dynamique limite de l'électron se trouve être alors formellement décrite par une équation diffusive, de type Fokker-Planck, qui est de la forme,

$$\partial_t f + v \partial_x f - x \partial_v f = \partial_v (v f) + \Delta_v f . \quad (3.5)$$

Ici, $f \equiv f(t, x, v)$ est la probabilité, à l'instant t , que l'électron possède la vitesse v et la position x . Le terme de transport $v \partial_x f - x \partial_v f$ décrit le mouvement d'oscillateur harmonique de l'électron, et le terme de droite est la somme d'un terme de friction et d'un terme de diffusion, qui sont la trace, à la limite, de l'interaction électron/réservoir. Cette équation est irréversible en temps.

La dérivation formelle de [CL1] pose plusieurs questions :

1- comme nous le montrons dans [14], et comme nous l'expliquons rapidement ci-dessus, l'émergence d'une diffusion dans l'approche de [CL1] repose sur les limites $\beta \rightarrow 0$, $\Omega \rightarrow \infty$, qui forcent de manière finalement assez artificielle l'apparition d'un bruit blanc. Ainsi, tout écart par rapport à ces deux limites dans [CL1] fournit un terme de forçage différent, et donc une limite différente (non-diffusive). Or il est *a priori* possible dans ce contexte, et au moins formellement, d'obtenir un régime diffusif pour un électron couplé avec un système de photons/phonons de pulsations *bornées* et à température *fixée* (voir [Di1,2], [HR], [UZ]). Pour cette raison, nous nous attachons dans [14] à lever ces restrictions fortes de l'approche [CL1], et à voir la diffusion comme le résultat d'un mécanisme plus général, et plus proche de l'esprit d'autres travaux physiques, comme par exemple [CTDRG].

2- l'usage de Hamiltoniens du type de (3.1) (systèmes de N oscillateurs harmoniques couplés *linéairement* à une particule test) en vue de dériver des équations de type Fokker-Planck est fait dans de nombreux travaux de physique ([Di1,2], [Ha], [HR], [UZ], [FV]). Les travaux mathématiques rigoureux sur ce type de modèles sont moins abondants. Citons [SDLL] pour une approche "algèbre d'opérateurs", [CLL] pour une approche par intégrales de chemin, ou encore le programme de Jakšić et Pillet [JP] visant à étudier la thermalisation par une approche spectrale. Citons aussi [Ar] et [FLM]. Tous ces travaux utilisent néanmoins des Hamiltoniens du type (3.1), en particulier l'hypothèse de couplage linéaire est faite. Évidemment, une telle hypothèse simplificatrice donne lieu à un Hamiltonien quadratique (pour les oscillateurs), de sorte que de nombreuses quantités deviennent explicitement calculables par simple intégration Gaussienne. Dans les travaux cités, comme dans [14], le traitement de la limite $N \rightarrow \infty$ est en particulier rendu possible par cette hypothèse (sans elle, la limite lorsque $N \rightarrow \infty$ pose à vrai dire des problèmes très ardues). Nous soulignons toutefois dans [14], que le couplage linéaire, qui n'est valable *a priori* que dans des régimes où l'électron est "près" de l'origine (voir plus haut), est peu

compatible avec le régime diffusif obtenu à la limite : dans ce dernier cas en effet, l'électron est censé diffuser loin de l'origine, sur des échelles d'espace de taille $t^{1/2}$ en temps t .

3.2 Résultats présentés dans ce mémoire ([14])

On reprend ici un système {électron + réservoir d'oscillateurs} comme on l'a décrit dans le paragraphe 3.1 ci-dessus. On adopte d'emblée un point de vue cinétique, et on considère la distribution de Wigner $W^N(t, x, v, R_1, P_1, \dots, R_N, P_N)$ du système (voir [Wi]) : elle décrit, à l'instant t , la probabilité que l'électron possède la position x et la vitesse v , et que l'oscillateur numéro un possède la position R_1 et la vitesse P_1 , etc ... La fonction W^N dépend bien sûr de N , mais aussi (c'est implicite) des paramètres d'échelle λ , β , et Ω .

Au vu du Hamiltonien H (3.1), et de la valeur de V (3.2), il est très classique d'affirmer que la fonction W^N satisfait l'équation suivante,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W^N + v \frac{\partial}{\partial x} W^N - x \frac{\partial}{\partial v} W^N + \left(\sum_{j=1}^{N\Omega} \left[P_j \frac{\partial}{\partial R_j} W^N - \omega_j^2 R_j \frac{\partial}{\partial P_j} W^N \right] \right) \\ - \frac{\lambda}{\sqrt{N}} \left(\sum_{j=1}^{N\Omega} \omega_j R_j \frac{\partial}{\partial v} W^N + \sum_{j=1}^{N\Omega} \omega_j x \frac{\partial}{\partial P_j} W^N \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.6)$$

(voir par exemple [FH]). Si le potentiel $V(x)$ dans (3.1) n'est pas quadratique, il faut remplacer le terme $-x(\partial W^N/\partial v)$ dans l'équation (3.6) par un opérateur pseudo-différentiel en v , qui, dans la limite semi-classique, se comporte comme $-(\partial V(x)/\partial x)(\partial W^N/\partial v)$. Ce fait est bien connu (voir [LP], [MRS]). Dans notre cas, notre motivation principale étant de dériver rigoureusement un terme de diffusion partant de l'équation (3.6), nous nous restreignons volontairement au cas particulier (3.2) : le passage à un potentiel général ne pose pas de problème supplémentaire (voir remarque 3.2 sur ce point).

L'hypothèse (3.4) sur la donnée initiale, se traduit, pour présenter les choses simplement, par le fait que la fonction de Wigner W^N initiale est gaussienne,

$$W^N(0, x, v, R_1, P_1, \dots, R_N, P_N) = * \exp(-[*x^2 + *v^2 + \sum_j (*R_j^2 + *P_j^2)]) , \quad (3.7)$$

où les symboles * désignent des coefficients calculables dont nous ne donnons pas la valeur, et qui dépendent de N , λ .

On s'intéresse à la dynamique de l'électron seul. En notant $w^N(t, x, v)$ la probabilité (marginale) de trouver l'électron dans la position x et la vitesse v , il est classique d'écrire,

$$w^N(t, x, v) := \int_{\mathbb{R}^{2N}} W^N(t, x, v, R_1, P_1, \dots, R_N, P_N) dR_1 dP_1 \dots dR_N dP_N . \quad (3.8)$$

Nous ne notons pas la dépendance de w^N par rapport à λ , β , Ω pour simplifier. Bien que l'on dispose d'une équation simple sur la fonction W^N , on n'a pas a priori d'équation naturelle sur la seule marginale w^N . On sait simplement, par intégration de (3.6), que,

$$\partial_t w^N + v \partial_x w^N - x \partial_v w^N = \text{source}(t, x, v) , \quad (3.9)$$

et le terme de source dépend de toute la fonction W^N .

Nos résultats sont les suivants (voir [14] pour des résultats plus complets),

Théorème 3.1 Soit $w^N(t, x, v)$ comme ci-dessus.

(i) **(limite thermodynamique)** La limite suivante existe au sens des distributions,

$$w(t, x, v) := \lim_{N \rightarrow \infty} w^N(t, x, v) . \quad (3.10)$$

(ii) **(justification de [CL1])** On se place dans le régime,

$$\lambda = \beta^{1/2} , \beta \rightarrow 0 , \Omega \rightarrow \infty . \quad (3.11)$$

Dans ce cas la limite suivante existe au sens des distributions,

$$f_1(t, x, v) := \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \lim_{\beta \rightarrow 0} w(t, x, v) , \quad (3.12)$$

et ces deux limites ne commutent pas. La fonction f_1 satisfait l'équation de Fokker-Planck,

$$\partial_t f_1 + v \partial_x f_1 - x \partial_v f_1 = \Delta_v f_1 . \quad (3.13)$$

(iii) **(limite pour Ω fixé)** On se donne une échelle de temps T , et on se place dans le régime

$$\lambda = \beta^{1/2} , \beta \rightarrow 0 , T \rightarrow \infty , \text{ et } \Omega > 1 \text{ est fixé} . \quad (3.14)$$

On considère le comportement asymptotique de la fonction $w(Tt, T^{1/2}x, T^{1/2}v)$, i.e. le comportement de w pour les temps d'ordre T , les positions d'ordre $T^{1/2}$, et les vitesses d'ordre $T^{1/2}$. Pour cela, on définit une quantité moyenne sur un cycle de l'oscillateur harmonique,

$$\tilde{w}(t, x, v) := \frac{T}{2\pi} \int_t^{t+(2\pi/T)} w(Ts, T^{1/2}x, T^{1/2}v) ds \quad (3.15)$$

Alors, la limite suivante existe au sens des distributions,

$$f_2(t, x, v) := \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\beta \rightarrow 0} \tilde{w}(t, x, v) , \quad (3.16)$$

et les deux limites ne commutent pas. La fonction f_2 satisfait l'équation de la chaleur,

$$\partial_t f_2 = \Delta_x f_2 + \Delta_v f_2 . \quad (3.17)$$

(iv) **(limite à température fixée)** On se donne une échelle de temps T , et on se place dans le régime suivant, de type faible couplage (voir paragraphe 2.1),

$$\lambda = T^{-1/2} , T \rightarrow \infty , \Omega \rightarrow \infty , \text{ et } \beta > 0 \text{ est fixé} . \quad (3.18)$$

Alors, dans la limite $\lim_{\Omega \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty}$, un résultat analogue à (iii) ci-dessus a lieu pour la fonction $w(Tt, x, v)$ (comportement en temps long d'ordre T et position/vitesses d'ordre 1), et les deux limites ne commutent pas. D'où il résulte l'existence d'une fonction f_3 qui satisfait une équation de Fokker-Planck de la forme (ici c_β est un coefficient qui dépend de β),

$$\partial_t f_3 = c_\beta \partial_v (v f_3) + \Delta_v f_3 . \quad (3.19)$$

Remarque 3.1

1- La partie (i) du Théorème affirme que l'effet cumulé des N oscillateurs a une influence bornée (en fait : d'ordre λ^2/β) sur la dynamique de l'électron, comme l'analyse formelle le montre.

2- La partie (ii) du Théorème donne une formulation mathématique rigoureuse au résultat présenté dans [CL1]. Ce n'est néanmoins pas une simple difficulté technique que nous résolvons ici : la limite formelle proposée dans [CL1] conduit en effet à une équation du type Fokker-Planck, mais il s'avère que celle-ci ne satisfait pas le principe du maximum. En précisant la limite comme nous le faisons, on restaure au passage le principe du maximum (voir aussi [ALMS]).

3- La partie (iii) du Théorème permet de s'affranchir de la contrainte $\Omega \rightarrow \infty$ de [CL1], et exhibe en fait le terme de diffusion comme un effet cumulé, en temps long, de résonances entre les oscillations du réservoir aux pulsations ω_j , et les oscillations propres de l'électron à la pulsation 1 (voir l'esquisse de preuve fournie). Le choix d'échelles de temps d'ordre T et, simultanément, d'échelles d'espace (et de vitesses) d'ordre $T^{1/2}$ est naturel, et correspond bien à une dynamique diffusive : en temps T , l'électron atteint, grâce à la diffusion, des vitesses d'ordre $T^{1/2}$, et donc (grâce au mouvement basique d'oscillation à la pulsation 1) des positions d'ordre $T^{1/2}$ également. De ce fait, l'opération de moyenne sur un cycle de l'oscillateur harmonique, telle qu'on la fait dans (3.15), est également naturelle. Elle signifie que l'on filtre le mouvement d'oscillation de l'électron pour "voir" la diffusion.

4- La partie (iv) du Théorème permet de s'affranchir de la limite $\beta \rightarrow 0$ de [CL1]. Ici, le mécanisme est différent : comme nous l'avons rapidement écrit au paragraphe 3.1 ci-dessus, l'interaction avec le bain de photons/phonons a ici naturellement une influence d'ordre $\lambda^2/\beta \sim \lambda^2$ sur la dynamique de l'électron. Pour des temps d'ordre $T \sim 1/\lambda^2$, l'effet cumulé du couplage est bien d'ordre 1.

5- Le régime $\lambda \sim \beta^{1/2}$ utilisé dans les points (ii) et (iii) est naturel, et provient du fait que l'interaction avec le bain de photons/phonons a dans ces cas une influence d'ordre $\lambda^2/\beta \sim 1$ sur la dynamique de l'électron (voir paragraphe 3.1).

6- Tous les résultats ci-dessus affirment la convergence d'une dynamique réversible vers une dynamique irréversible, dans un cadre parfaitement déterministe. Il n'y a là aucun paradoxe : un tel phénomène est rendu possible par l'opération d'intégration sur les variables R_j, P_j faite dès le départ (voir (3.8)). Il est néanmoins notable qu'un modèle très simple, impliquant en fin de compte $N + 1$ oscillateurs harmoniques, présente selon certaines asymptotiques un comportement diffusif.

7- Les parties (iii) à (iv) du Théorème 3.1 ci-dessus s'adaptent aisément à d'autres répartitions en fréquence que la répartition (3.3), à laquelle le présent exposé se restreint. En revanche, la partie (ii), qui donne une version rigoureuse de [CL1], n'est valable que sous l'hypothèse (3.3) (l'explication en est donnée au paragraphe 3.1). Ceci indique à nouveau le caractère extrêmement rigide de la limite [CL1].

8- L'équation (3.17) du point (iii) est une équation de type chaleur : elle ne contient pas le terme de transport $v\partial_x - x\partial_v$ (ce qui est normal car ce terme est précisément éliminé par l'opération de moyenne (3.15)) ; elle ne contient pas non plus de terme de friction $\partial_v(vf_2)$. L'équation (3.13) du point (ii) inclut le terme de transport, mais la friction est également nulle. Pour finir, l'équation (3.19) ne contient pas de terme de transport (la raison en est la même qu'au point (iii)), mais elle contient à la fois un terme de friction et un terme de diffusion. On peut montrer de plus que le rapport friction/diffusion, égal à c_β , est en

fait de l'ordre de β pour les petites valeurs de β . En d'autres termes, dans le point (iv), nous prouvons rigoureusement, au moins pour les grandes valeurs de la température, la loi d'Einstein qui relie friction, diffusion, et température.

9- Il est également possible de traiter la limite lorsque $N \rightarrow \infty$ du point (i) par des méthodes abstraites usant du formalisme de la seconde quantification ([RS], [BR]). Nous ne développons pas ce point.

Esquisse de preuve du Théorème 3.1

Première étape

La première difficulté consiste à dériver, avant tout passage à la limite, une équation fermée sur la marginale w^N (voir (3.8)). Pour cela, on commence par résoudre l'équation de transport (3.6) par la méthode des caractéristiques. On écrit pour cela le système d'équations différentielles,

$$\begin{aligned} X'(t) &= P(t), & P'(t) &= -X(t) - \frac{\lambda}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N\Omega} \omega_j R_j(t), \\ R'_j(t) &= P_j(t), & P'_j(t) &= -\omega_j^2 R_j(t) - \frac{\lambda}{\sqrt{N}} \omega_j X(t), \end{aligned} \quad (3.20)$$

avec données initiales $X(0) = x$, $P(0) = v$, $R_j(0) = R_j$, $P_j(0) = P_j$. On peut alors, dans (3.20), résoudre $R_j(t)$ et $P_j(t)$ en fonction de $X(t)$ et des données initiales. Ceci, joint à l'information sur la donnée initiale (3.7) et à la définition (3.8), donne une formule de la forme,

$$\begin{aligned} w^N(t, x, v) &= \\ &\int_{\mathbb{R}^{2N}} w(0, X_N(t), P_N(t)) \frac{1}{(2\pi)^N} \exp\left(-\sum_{j=1}^{N\Omega} \frac{r_j^2 + p_j^2}{2}\right) dr_1 dp_1 \cdots dr_N dp_N. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Ici, les fonctions P_N et X_N dépendent implicitement des r_j, p_j (et de x, v , ainsi que des paramètres λ, β, Ω). On a $P_N(t) = X'_N(t)$, et $X_N(t)$ satisfait,

$$X''_N(t) + X_N(t) = f_N(t) + \lambda^2 \Omega X_N(t) - \int_0^t M_N(t-s) X'_N(s) ds - x M_N(t), \quad (3.22)$$

quitte à définir,

$$\begin{aligned} f_N(t) &= -\frac{\lambda}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N\Omega} A_\beta(\omega_j) [r_j \cos(\omega_j t) + p_j \sin(\omega_j t)], \\ A_\beta(\omega) &= \sqrt{\frac{\omega(1 + \cosh(\beta\omega))}{2 \sinh(\beta\omega)}}, \\ M_N(t) &= \frac{\lambda^2}{N} \sum_{j=1}^{N\Omega} \cos(\omega_j t). \end{aligned} \quad (3.23)$$

En d'autres termes, la dynamique de w^N est donnée par une intégration gaussienne (3.21), et dépend des trajectoires X_N , solutions de l'équation différentielle ordinaire (3.22). La

dynamique de X_N est d'abord gouvernée par un terme d'oscillateur harmonique à pulsation 1, mais l'interaction de l'électron avec le réservoir introduit des termes supplémentaires : (i) une translation de la pulsation d'une quantité $\lambda^2\Omega$ ("phase shift" : ce terme tend vers 0 dans toutes les asymptotiques considérées ici, voir néanmoins [14] pour des résultats plus généraux) ; (ii) un terme de mémoire en temps ; (iii) un terme de forçage $f_N(t)$. Le terme en $-xM_N$ n'est pas pertinent.

Remarque 3.2 Dans le cas où le mouvement de base de l'électron est régi par un potentiel $V(x)$ qui n'est pas quadratique, il faut ici faire une limite semi-classique, et le terme en $X_N'' + X_N$ dans (3.22) devient $X_N'' - (\partial_x V)(X_N)$. C'est une conséquence aisée des méthodes développées dans [14], et nous ne développons pas ce point.

Deuxième étape : limite lorsque $N \rightarrow \infty$

On calcule explicitement l'intégrale gaussienne (3.21) et on est ramené à passer à la limite dans des sommes de Riemann. Alternativement, on peut utiliser des estimations standard sur les processus gaussiens. Au terme de cette étape, si $(\mathcal{F}w)(t, \theta, \sigma)$ désigne la transformée de Fourier de w dans les variables x et v , on est ramené pour l'essentiel à,

$$(\mathcal{F}w)(t, \theta, \sigma) = (\mathcal{F}w)(0, \theta \sin t + \sigma \cos t, \theta \cos t - \sigma \sin t) \exp(-Q(t)) , \quad (3.24)$$

avec,

$$Q(t) = \lambda^2 \int_0^\Omega A_\beta^2(\omega) \left| \int_0^t [\theta \sin s + \sigma \cos s] \exp(-i\omega s) ds \right|^2 d\omega . \quad (3.25)$$

Ici, le premier facteur dans (3.24) représente le mouvement basique d'oscillateur harmonique de l'électron, tandis que le terme exponentiel est la trace de l'interaction avec le réservoir. Techniquement, exhiber un comportement diffusif pour l'électron revient dès lors à montrer que, dans certaines asymptotiques, $Q(t)$ se comporte comme $t\theta^2$, ou bien $t\sigma^2$ (comportement linéaire en temps, quadratique en θ et/ou σ).

Troisième étape

L'asymptotique (3.11) (ii) donne directement,

$$\begin{aligned} Q(t) &\sim \lambda^2 \beta^{-1} \int_0^{+\infty} \left| \int_0^t [\theta \sin s + \sigma \cos s] e^{-i\omega s} ds \right|^2 d\omega \\ &\sim \int_0^t [\theta \sin s + \sigma \cos s]^2 ds , \end{aligned} \quad (3.26)$$

et le résultat (ii) en découle. La deuxième équivalence résulte de l'égalité de Parseval, et on voit là la nécessité absolue de prendre $\beta \rightarrow 0$ (c'est ce qui donne $A_\beta^2(\omega) \sim \beta^{-1}$), et $\Omega \rightarrow \infty$ (c'est ce qui nous ramène à l'égalité de Parseval), dans l'asymptotique de [CL1].

Pour les points (iii) et (iv), on utilise que, en temps t grand, le comportement de $Q(t)$ est dominé par les résonnances entre les termes $\sin s$, $\cos s$ d'une part, et le terme $\exp(-i\omega s)$, dans (3.25). La singularité principale est donc apportée par les contributions $\omega \approx 1$, et l'on obtient,

$$Q(t) \sim \lambda^2 A_\beta^2(1) \times t[\theta^2 + \sigma^2] , \quad (3.27)$$

lorsque $t \rightarrow \infty$. On voit ici la nécessité de l'hypothèse $\Omega > 1$ dans (iii) (c'est elle qui permet l'apparition de résonnances). L'estimation (3.27) présente toute l'uniformité nécessaire par rapport à λ , β , Ω , et les points (iii) et (iv) en découlent. \square

4 Limite haute-fréquence dans l'équation d'Helmholtz

4.1 L'équation d'Helmholtz haute-fréquence

Toute cette section 4 est consacrée à l'étude de l'asymptotique, lorsque le paramètre $\varepsilon > 0$ tend vers zéro, de l'équation d'Helmholtz haute-fréquence avec un terme de source,

$$+i\frac{\alpha_\varepsilon}{\varepsilon}u^\varepsilon(x) + \Delta_x u^\varepsilon(x) + \frac{n^2(x)}{\varepsilon^2}u^\varepsilon(x) = \mathcal{S}_\varepsilon(x). \quad (4.1)$$

Ici, l'inconnue est la fonction $u^\varepsilon(x) \in \mathbb{C}$, qui dépend d'une variable d'espace $x \in \mathbb{R}^d$. L'équation d'Helmholtz peut être vue comme une version indépendante du temps de l'équation des ondes, et dans cette mesure il est naturel de penser que u^ε représente, pour fixer les idées, l'intensité complexe, au point x , d'un rayonnement électromagnétique (propagation de lumière, d'ondes radio, etc ...). Le petit paramètre ε mesure la longueur d'onde du rayonnement considéré. Également, la fonction $n(x) \in \mathbb{R}$, qui est une donnée du problème, représente l'indice de réfraction du milieu de propagation, et il dépend de x . Le second membre $\mathcal{S}_\varepsilon(x)$, dont la valeur est précisée plus loin, modélise une source de rayonnement (on peut penser à une antenne émettrice par exemple), et c'est là encore une donnée du problème. Enfin, le facteur $\alpha_\varepsilon > 0$, qui dépend de ε , est un paramètre de régularisation : le terme $i(\alpha_\varepsilon/\varepsilon)u^\varepsilon$ dans (4.1) restaure le défaut d'ellipticité de l'opérateur d'Helmholtz $+\Delta_x + n^2$, et permet de spécifier u^ε de manière unique. Alternativement, et dans la limite où $\alpha_\varepsilon/\varepsilon$ tend vers zéro par valeurs positives, une telle régularisation peut être vue comme une condition de comportement à l'infini pour u^ε (on parle de *condition de radiation à l'infini*), qui s'ajoute à l'équation $\Delta_x u^\varepsilon + (n^2/\varepsilon^2)u^\varepsilon = \mathcal{S}_\varepsilon$. Dans toute la suite on fait l'hypothèse,

$$\alpha_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0, \text{ et il existe } \gamma > 0 \text{ tel que } \alpha_\varepsilon > \varepsilon^\gamma. \quad (4.2)$$

Le premier point signifie que l'on se place dans une asymptotique où la régularisation disparaît. Le second, plus technique, signifie que notre analyse nécessite un paramètre α_ε qui ne tend pas vers zéro plus vite qu'une puissance de ε . Il est à noter que dans ces conditions le terme $\alpha_\varepsilon/\varepsilon$ dans (4.1) peut tendre vers 0.

Précisons maintenant le type de seconds membres \mathcal{S}_ε considérés ici. Dans la mesure où une solution u^ε de (4.1) présente naturellement des oscillations à la fréquence $1/\varepsilon$ (à cause de l'opérateur d'Helmholtz haute-fréquence $\Delta + n^2/\varepsilon^2$), il est naturel de considérer des termes \mathcal{S}_ε qui présentent le *même* type d'oscillations : on souhaite décrire quantitativement l'interaction entre les oscillations de u^ε dues à l'opérateur d'Helmholtz, et celles créés par \mathcal{S}_ε elle-même. Comme de plus \mathcal{S}_ε modélise une source de rayonnement (une antenne par exemple), on se place dans l'hypothèse où celle-ci est bien localisée en espace. Pour ces raisons, on considère dans la suite deux types de termes \mathcal{S}_ε :

- cas d'une source concentrée près d'un point (source ponctuelle),

$$\mathcal{S}_\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon^{\frac{3+d}{2}}} S\left(\frac{x}{\varepsilon}\right). \quad (4.3)$$

- cas d'une source concentrée près d'une surface (source surfacique),

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\varepsilon(x) &= \frac{1}{\varepsilon^q} \int_\Gamma A(y) \exp\left(i \frac{\phi(y)}{\varepsilon}\right) S\left(\frac{x-y}{\varepsilon}\right) d\sigma(y) \\ &= \frac{1}{\varepsilon^q} \int_{\mathbb{R}^p} A(\gamma(t)) \exp\left(i \frac{\phi(\gamma(t))}{\varepsilon}\right) S\left(\frac{x-\gamma(t)}{\varepsilon}\right) dt. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Nous détaillons nos notations. Dans tous les cas, les fonctions réelles S , ϕ et A sont des données. On les supposera régulières, et on prendra S et A suffisamment petites à l'infini (voir plus bas). Dans (4.4), Γ est une variété régulière, de dimension p dans \mathbb{R}^d ($p \leq d$). La mesure de surface euclidienne de Γ est notée $d\sigma$, et dans la deuxième égalité de (4.4), on suppose que Γ admet une paramétrisation globale $\gamma(t)$, t parcourant \mathbb{R}^p .

Dans le premier cas, la source est concentrée dans un petit volume de taille ε près de l'origine, et S joue le rôle d'un profil de concentration. Le préfacteur $\varepsilon^{(3+d)/2}$ donne ici la taille critique pour laquelle l'interaction entre les oscillations de l'opérateur d'Helmholtz $\Delta_x + n^2/\varepsilon^2$, et celles de \mathcal{S}_ε , a un effet d'ordre 1 sur la solution u^ε , dans la limite où $\varepsilon \rightarrow 0$. Dans le second cas, la source est concentrée dans un petit voisinage, de taille ε , de la surface Γ , et S joue encore le rôle d'un profil de concentration. Fait nouveau, la source \mathcal{S}_ε porte dans ce cas un signal oscillant à la fréquence $1/\varepsilon$, d'amplitude $A(y)$ et de phase $\phi(y)$ au point $y \in \Gamma$. L'exposant q critique dépend des dimensions d et p , ainsi que de certaines hypothèses géométriques sur la phase ϕ , et nous précisons sa valeur dans la suite.

Suivant une problématique très classique, nous souhaitons décrire la propagation de quantités quadratiques en u^ε , comme par exemple l'énergie locale $|u^\varepsilon(x)|^2$ (énergie portée par le rayonnement au point x), dans la limite où $\varepsilon \rightarrow 0$. Comme l'ont montré les travaux de Tartar [Ta], Lions et Paul [LP], Gérard, Markowich, Mauser, et Poupaud [Ge], [GMMP] (voir aussi la synthèse [Bu]), un outil pertinent dans ce cadre est fourni par la transformation de Wigner : à la fonction fortement oscillante $u^\varepsilon(x)$ on associe une fonction $f^\varepsilon(x, \xi)$ qui mesure, pour caricaturer, l'énergie portée par la fonction $u^\varepsilon(x)$, au point x et à la fréquence $\xi \in \mathbb{R}^d$. Mathématiquement, elle est définie comme,

$$f^\varepsilon(x, \xi) := \int_{\mathbb{R}^d} \exp(-iy \cdot \xi) u^\varepsilon\left(x + \varepsilon \frac{y}{2}\right) \overline{u^\varepsilon\left(x - \varepsilon \frac{y}{2}\right)} dy, \quad (4.5)$$

où la barre désigne la conjugaison complexe. Comme u^ε varie sur des échelles d'ordre ε , les décorrelations $x + \varepsilon y/2$ et $x - \varepsilon y/2$ dans (4.5) permettent de "lire" les oscillations de u^ε à cette échelle. Pour citer un exemple illustratif, si u^ε est un état WKB, c'est-à-dire $u^\varepsilon(x) = a(x) \exp(i\psi(x)/\varepsilon)$, avec a et ψ réguliers, il est classique d'affirmer que $f^\varepsilon(x, \xi)$ tend, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, vers la mesure $|a(x)|^2 \delta(\xi - \nabla\psi(x))$: au point x , l'énergie est, dans ce cas, asymptotiquement égale à $|a(x)|^2$, et elle est portée par les fréquences $\xi = \nabla\psi(x)$, ce qui correspond à l'intuition.

La suite de cette section 4 est dédiée à la description du comportement limite de $f^\varepsilon(x, \xi)$ définie par (4.5) lorsque u^ε résoud (4.1), avec source donnée par (4.3) ou (4.4).

4.2 Asymptotique formelle ([15], [16])

Afin de mettre en évidence les mécanismes importants qui gouvernent le comportement asymptotique de f^ε , nous commençons par citer ici un résultat *formel* de convergence de

f^ε , sans poser pour l'instant de conditions sur les différentes données n , Γ , S , A , et ϕ , du problème. Nous énonçons notre résultat, établi dans ([15], [16]), comme un Théorème. Néanmoins, les conditions précises de validité du Théorème 4.1 sont données plus loin, dans les Théorème 4.2 et 4.3 au paragraphe 4.3 ci-dessous.

Nous commençons par préciser un point de notation.

Notation Pour un point $y \in \Gamma$ donné, et un vecteur $\xi \in \mathbb{R}^d$, nous notons,

$$\xi = \xi_y^\tau + \xi_y^\nu \in T_y\Gamma + T_y^\perp\Gamma . \quad (4.6)$$

Suivant le contexte, ξ_y^τ sera considéré comme un vecteur de \mathbb{R}^p , ou bien un vecteur d'un sous-espace de dimension p de \mathbb{R}^d , sans distinction dans l'écriture. Également, si Γ est une variété linéaire, on pourra oublier l'indexation par y et nous noterons simplement $\xi = \xi^\tau + \xi^\nu$. Dans le même esprit, nous noterons, pour $y \in \Gamma$,

$$\nabla\phi(y) = \nabla^\tau\phi(y) + \nabla^\nu\phi(y) \in T_y\Gamma + T_y^\perp\Gamma . \quad (4.7)$$

Enfin, nous noterons systématiquement par \hat{g} la transformée de Fourier d'une fonction g , définie par, $\hat{g}(\xi) = \int_{\mathbb{R}^d} \exp(-ix \cdot \xi)g(x) dx$,

Avec ces notations, nous annonçons le,

Théorème 4.1 (résultat formel : voir Théorèmes 4.2 et 4.3 pour les conditions précises de validité) Soit u^ε une solution de (4.1), où \mathcal{S}_ε est donnée par (4.3) ou bien (4.4). Soit f^ε donnée par (4.5). Alors f^ε converge, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, vers une mesure $f(x, \xi)$. De plus,

(i) **(source ponctuelle)** ([15]) Supposons \mathcal{S}_ε donnée par (4.3). Alors la fonction $f(x, \xi)$ est l'unique solution de,

$$+0f + \xi \cdot \nabla_x f + \frac{1}{2} \nabla_x n^2(x) \cdot \nabla_\xi f = Q_1(x, \xi) , \quad (4.8)$$

où $Q_1(x, \xi)$ est définie par,

$$Q_1(x, \xi) = \delta(x) \delta(\xi^2 - n^2(0)) |\hat{S}(\xi)|^2 . \quad (4.9)$$

(ii) **(source surfacique, régime propagatif)** ([16]) Supposons \mathcal{S}_ε donnée par (4.4). Nous supposons de plus que la phase ϕ satisfait l'hypothèse géométrique,

$$\forall y \in \Gamma , \quad |\nabla^\tau\phi(y)|^2 < n^2(y) . \quad (4.10)$$

Alors, quitte à choisir,

$$q = \frac{3 + d + p}{2} , \quad (4.11)$$

dans (4.4), $f(x, \xi)$ est l'unique solution de,

$$+0f + \xi \cdot \nabla_x f + \frac{1}{2} \nabla_x n^2(x) \cdot \nabla_\xi f = Q_2(x, \xi) , \quad (4.12)$$

où $Q_2(x, \xi)$ est définie par,

$$Q_2(x, \xi) = \int_{\Gamma} \delta(x - y) \delta(\xi_y^\tau - \nabla^\tau \phi(y)) \delta(\xi^2 - n^2(y)) |\widehat{S}(\xi)|^2 |A(y)|^2 d\sigma(y). \quad (4.13)$$

(iii) **(source surfacique, régime résonnant)** ([16]) Supposons \mathcal{S}_ε donnée par (4.4). Nous supposons de plus que la phase ϕ satisfait l'hypothèse géométrique,

$$\forall y \in \Gamma, \quad |\nabla^\tau \phi(y)|^2 > n^2(y). \quad (4.14)$$

Alors, quitte à choisir,

$$q = \frac{4 + d + p}{2}, \quad (4.15)$$

dans (4.4), $f(x, \xi)$ est donnée comme,

$$f(x, \xi) = \int_{\Gamma} \delta(x - y) \delta(\xi_y^\tau - \nabla^\tau \phi(y)) \frac{|\widehat{S}(\xi)|^2 |A(y)|^2}{[|\nabla \phi(y)|^2 - n^2(y)]} d\sigma(y). \quad (4.16)$$

(iv) **(source surfacique, régime caractéristique)** ([16]) Supposons \mathcal{S}_ε donnée par (4.4). Nous supposons de plus que la phase ϕ satisfait l'hypothèse géométrique,

$$\forall y \in \Gamma, \quad |\nabla^\tau \phi(y)|^2 = n^2(y). \quad (4.17)$$

Nous supposons enfin que Γ est une variété linéaire. Alors, quitte à choisir $q = (4 + 3d + p)/4$, on peut identifier la limite f de manière analogue aux points (ii) et (iii).

Avant de donner une esquisse de preuve du Théorème 4.1, nous donnons quelques commentaires qui nous semblent importants :

1- (Condition de radiation) Les résultats (i) et (ii) affirment que f satisfait une équation de transport, ce qui est très classique dans ce contexte [LP]. Plus précisément, dans ces cas l'énergie se trouve être transportée par les rayons de l'optique géométrique,

$$\begin{aligned} X'(t) &= \Xi(t), \quad X(0) = x, \\ \Xi'(t) &= \frac{1}{2} \nabla_x n^2(X(t)), \quad \Xi(0) = \xi. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Dans cette perspective, le terme $+0f$ dans (4.8) et (4.12) spécifie une condition de radiation à l'infini pour f , qui est la trace, à la limite, de la condition de radiation mise au départ sur u^ε . Ce terme définit f comme la limite lorsque $\eta \rightarrow 0$ de l'unique solution f_η de $+ \eta f_\eta + \dots = Q_k$ ($k = 1$ ou 2), ou bien, alternativement, par,

$$f(x, \xi) = \int_0^{+\infty} Q_k(X(s), \Xi(s)) ds. \quad (4.19)$$

2- Bien que le transport de l'énergie se fasse suivant les rayons de l'optique géométrique dans (4.8) et (4.12), le terme de source Q_k ($k = 1$ ou 2), qui est la trace, à la limite, du second membre \mathcal{S}_ε dans (4.1), ne peut en revanche être obtenu par des techniques de type optique géométrique.

3- L'équation (4.8) affirme que l'énergie f se propage dans le milieu d'indice n , tout en étant alimentée par un terme source qui est (a) concentré en espace au point $x = 0$, et (b) concentré sur les fréquences ξ telles que $\xi^2 = n^2(0)$. Le facteur $|\widehat{S}(\xi)|^2$ agit comme une modulation. Le point (a) est bien sûr conséquence de la concentration de \mathcal{S}_ε en $x = 0$ dans l'équation d'Helmholtz originale. Le point (b) traduit que l'opérateur d'Helmholtz haute-fréquence $\Delta_x + n^2/\varepsilon^2$ force u^ε à osciller à la fréquence n/ε .

4- De même, le terme source Q_2 dans (4.12) est naturellement concentré en espace sur la surface Γ , repérée par le point courant y (c'est le sens du facteur $\delta(x - y)$). Il est aussi concentré sur les fréquences ξ telles que $\xi^2 = n^2(y)$. La raison de ces deux faits est la même que dans le cas d'une source ponctuelle. Il apparaît néanmoins un phénomène nouveau dans le cas d'une source surfacique : le long de la surface Γ , la source \mathcal{S}_ε définie par (4.4) présente dans ce cas des oscillations de la forme $A(y) \exp(i\phi(y)/\varepsilon)$, qui ont lieu en quelque sorte dans la direction tangentielle à Γ . Dans la limite haute-fréquence, celles-ci se trouvent alimenter de manière sélective les fréquences ξ telles que $\xi^\tau = \nabla^\tau \phi$ (c'est le sens du terme $\delta(\xi^\tau - \nabla^\tau \phi(y))$ dans (4.13)).

5- Le cas d'une source surfacique possède la spécificité de créer, à la limite, un terme source qui sélectionne les ξ tels que la double condition $\xi^2 = n^2$ et $\xi^\tau = \nabla^\tau \phi$ est vérifiée. Ceci explique l'émergence naturelle de trois régimes différents : dans le cas résonnant par exemple, cette double condition ne peut être satisfaite, et il se trouve que ce sont les oscillations liées à l'opérateur d'Helmholtz qui dominent (c'est le sens de (4.16)). Pour cette raison, et par comparaison au cas propagatif, il est alors nécessaire d'amplifier le terme source \mathcal{S}_ε pour "voir" son effet asymptotique (c'est pourquoi l'exposant fourni par (4.15) est plus grand que celui de (4.11)). Une deuxième conséquence est que, dans le cas résonnant, et contrairement au cas propagatif, l'énergie f elle-même est entièrement concentrée sur la surface Γ (voir (4.16)) : elle ne se propage pas.

6- la distinction entre régimes propagatif, résonnant, et caractéristique, est semblable à la distinction entre rayons hyperboliques, elliptiques, et "glancing", qui apparaît en théorie semi-classique dans les domaines possédant un bord ([Mi], [GL], [Wil]).

Esquisse de preuve du Théorème 4.1

On se restreint ici aux cas (i) et (ii), les autres cas étant obtenus similairement.

Première étape

On commence par effectuer une transformation de Wigner sur l'équation d'Helmholtz (4.1). On obtient facilement,

$$+ \alpha_\varepsilon f^\varepsilon + \xi \cdot \nabla_x f^\varepsilon + \delta n^\varepsilon(x, \xi) *_\xi f^\varepsilon(x, \xi) = Q_\varepsilon(x, \xi), \quad (4.20)$$

où $*_\xi$ désigne la convolution en ξ , et l'on a,

$$\delta n^\varepsilon(x, \xi) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \nabla_x n^2(x) \cdot \nabla_\xi \delta(\xi), \quad (4.21)$$

$$Q_\varepsilon(x, \xi) = \varepsilon \operatorname{Im} \int_{\mathbb{R}^d} \exp(-iy \cdot \xi) \mathcal{S}_\varepsilon \left(x + \varepsilon \frac{y}{2} \right) \overline{u^\varepsilon \left(x - \varepsilon \frac{y}{2} \right)} dy. \quad (4.22)$$

L'idée est dès lors la suivante : on souhaite *a priori* calculer la limite de f^ε , une quantité quadratique en u^ε . Néanmoins l'équation (4.20) (jointe à (4.21)) ramène manifestement cette question au calcul de la limite du terme source Q_ε défini par (4.22), et c'est une

quantité linéaire en u^ε . On s'attache donc dans la suite à (a) “résoudre” l'équation (4.1) en u^ε , (b) reporter la “valeur” de u^ε obtenue dans l'équation (4.22) et passer à la limite. L'étape (b) revient à quantifier précisément l'interaction entre les oscillation de u^ε d'une part, et les oscillations de \mathcal{S}_ε d'autre part, pour des valeurs de x “proches” du support de \mathcal{S}_ε (c'est-à-dire proches de l'origine, ou, respectivement, de la surface Γ). La réalisation de ce programme nécessite de distinguer le cas d'une source ponctuelle et le cas d'une source surfacique.

Deuxième étape (cas d'une source ponctuelle)

En raison du profil de concentration \mathcal{S}_ε dans (4.3), on introduit la fonction auxiliaire suivante,

$$w^\varepsilon(x) := \varepsilon^{(d-1)/2} u^\varepsilon(\varepsilon x) , \quad (4.23)$$

qui prend en compte le comportement de u^ε dans un voisinage de taille ε de l'origine. Par un changement de variable $x \rightarrow x/\varepsilon$ dans (4.22), on se convainc que Q_ε se concentre asymptotiquement à l'origine, et se comporte plus précisément comme,

$$Q_\varepsilon(x, \xi) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \delta(x) \operatorname{Im} \left(\widehat{S}(\xi) \overline{\widehat{w}^\varepsilon(\xi)} \right) . \quad (4.24)$$

Il reste donc à caractériser la limite de w^ε . Or, par (4.1), w^ε est solution de,

$$+i\alpha_\varepsilon \varepsilon w^\varepsilon + \Delta_x w^\varepsilon + n^2(\varepsilon x) w^\varepsilon = S(x) . \quad (4.25)$$

Ainsi, formellement, $w^\varepsilon \sim w$, où,

$$+i0w + \Delta_x w + n^2(0)w = S(x) . \quad (4.26)$$

Ici, le terme $+i0w$ spécifie w comme la limite lorsque $\eta \rightarrow 0^+$ de w_η , solution de $+i\eta w_\eta + \Delta_x w_\eta + n^2(0)w_\eta = S(x)$. C'est la trace, à la limite, du terme $+i\alpha_\varepsilon \varepsilon w^\varepsilon$ dans (4.25).

L'équation asymptotique (4.26) donne alors,

$$\widehat{w}(\xi) = \frac{\widehat{S}(\xi)}{-\xi^2 + n^2(0) + i0} , \quad (4.27)$$

et en reportant (4.27), (4.24), (4.21) dans (4.20), on obtient le point (i) du Théorème 4.1. En vertu de l'égalité bien connue $1/(x+i0) = \operatorname{pv}(1/x) - i\delta(x)$, on voit en particulier que la masse de Dirac $\delta(\xi^2 - n^2(0))$ dans le terme source Q_1 (4.9) provient bien de l'opérateur d'Helmholtz.

Remarque 4.1 Nous mentionnons tout de suite que la justification mathématique rigoureuse du passage à la limite de (4.25) à (4.26) constitue une difficulté clé de ce travail. Pour caricaturer, disons que l'équation (4.25) affirme que w^ε est solution de $\Delta_x w^\varepsilon + n^2(\varepsilon x) w^\varepsilon = S$, et que, lorsque x tend vers l'infini, on a la condition aux limites $(x/|x|) \cdot \nabla_x w^\varepsilon - in^2(\varepsilon x) w^\varepsilon \rightarrow 0$. De même, l'équation (4.26) affirme que w est solution de $\Delta_x w + n^2(0)w = S$, et que, lorsque x tend vers l'infini, on a la condition aux limites $(x/|x|) \cdot \nabla_x w - in^2(0)w \rightarrow 0$. (voir [Zh]). Avec ce point de vue, il est facile de passer rigoureusement à la limite de (4.25) à (4.26) lorsqu'on “oublie” la condition de radiation à l'infini, Il est en revanche très difficile de garder trace de la condition de radiation pour la limite w de w^ε . En effet, dans le cas

général, $n(0) \neq \lim_{x \rightarrow \infty} n(x)$. Le problème soulevé ici n'est que partiellement résolu à ce jour (voir les Théorèmes 4.2 et 4.3). Signalons toutefois que le passage à la limite de (4.25) à (4.26) est facile lorsque l'indice de réfraction $n(x)$ est constant. On peut en effet dans ce cas inverser explicitement l'opérateur d'Helmholtz, par transformée de Fourier (voir (4.27)).

Troisième étape (cas d'une source surfacique)

La démarche est analogue au cas d'une source ponctuelle. Cette fois-ci, pour *chaque* point $y \in \Gamma$, on met en évidence les concentrations et oscillations de u^ε près de y , en introduisant la fonction auxiliaire,

$$w_y^\varepsilon(x) := \varepsilon^{(d-p-1)/2} u^\varepsilon(y + \varepsilon x) \exp\left(-i \frac{\phi(y)}{\varepsilon}\right). \quad (4.28)$$

On a d'abord un résultat semblable à (4.24) : compte-tenu de la valeur de \mathcal{S}_ε (4.4), et de (4.28), on voit que la source Q_ε se concentre sur la surface Γ , et plus précisément,

$$Q_\varepsilon(x, \xi) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \operatorname{Im} \int_\Gamma \delta(x - y) \left(\int_{\mathbb{R}^d} A(y) \widehat{S}(\xi) \overline{\widehat{w}_y^\varepsilon(\xi)} d\xi \right) d\sigma(y). \quad (4.29)$$

(comparer avec (4.24)). Ainsi, il nous reste à caractériser le comportement limite de w_y^ε , pour chaque valeur de y . On a à ce stade une équation analogue à (4.25),

$$\begin{aligned} +i\varepsilon\alpha_\varepsilon w_y^\varepsilon(x) + \Delta_x w_y^\varepsilon(x) + n^2(y + \varepsilon x) w_y^\varepsilon(x) = \\ \frac{1}{\varepsilon^p} \int_\Gamma A(z) S\left(x + \frac{y - z}{\varepsilon}\right) \exp\left(i \frac{\phi(y) - \phi(z)}{\varepsilon}\right) d\sigma(z). \end{aligned} \quad (4.30)$$

On passe alors formellement à la limite dans tous les termes de cette équation (y compris la condition de radiation). L'intégrale sur Γ au second membre de (4.30) devient une intégrale sur le plan tangent $T_y\Gamma$. On obtient ainsi la convergence $w_y^\varepsilon \sim w_y$, où,

$$+i0w_y + \Delta_x w_y(x) + n^2(y)w_y(x) = A(y) \int_{T_y\Gamma} S(x + \tau) \exp(i\tau \cdot \nabla^\tau \phi(y)) d\tau. \quad (4.31)$$

Une nouvelle fois, cette équation se résout en w_y , et l'on obtient,

$$\widehat{w}_y(\xi) = A(y) \widehat{S}(\xi) \delta\left(\xi_y^\tau - \nabla^\tau \phi(y)\right) \frac{1}{n^2(y) - \xi^2 + i0}. \quad (4.32)$$

En reportant (4.32) et (4.29) dans (4.20) on montre le point (ii) du Théorème 4.1. On notera en particulier que les masses de dirac $\delta(\xi^2 - n^2(y))$, et $\delta(\xi^\tau - \nabla^\tau \phi(y))$, dans le terme source Q_2 (4.13), proviennent respectivement de l'opérateur d'Helmholtz, et de l'intégrale sur le plan tangent $T_y\Gamma$ qui apparaît dans (4.31). \square

4.3 Résultats précis de convergence ([15], [16])

La justification mathématique complète du Théorème 4.1 repose d'une part, bien sûr, sur les calculs déjà présentés dans le paragraphe 4.2, mais aussi sur :

1- l'obtention de bornes uniformes en ε pour les suites u^ε solutions de (4.1). Alternativement, il s'agit d'obtenir des estimations sur les suites w^ε (cas d'une source ponctuelle),

respectivement w_y^ε (cas d'une source surfacique), introduites plus haut (voir (4.23) et (4.28)).

2- l'obtention de bornes sur la fonction de Wigner f^ε naturellement associée à u^ε .

3- la justification du passage à la limite de (4.25) à (4.26) lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ dans le cas d'une source ponctuelle (respectivement, de (4.30) à (4.31) dans le cas d'une source surfacique). Comme nous l'avons déjà souligné, toute la difficulté réside ici dans l'analyse de la condition de radiation à l'infini (voir remarque 4.1).

À l'égard de toutes ces questions, il est très naturel de distinguer les cas d'une source ponctuelle et d'une source surfacique. Dans le premier cas en effet, l'équation (4.1), sur laquelle on souhaite passer à la limite, possède une homogénéité particulière *via* le changement de variables $x \rightarrow x/\varepsilon$. Ce point permet d'établir des résultats moins restrictifs lorsque la source est ponctuelle. En particulier, soulignons que le Théorème 4.2 inclut des indices de réfraction $n(x)$ variables, alors que le Théorème 4.3 est restreint au cas d'indices $n(x)$ constants.

Avant d'énoncer nos résultats, nous introduisons les espace fonctionnels pertinents en vue d'obtenir des bornes sur u^ε ,

Définition 4.1 *On définit la boule $C_{-1} := \{x \in \mathbb{R}^d / |x| \leq 1/2\}$, et, pour tout $j \in \mathbb{N}$, les couronnes $C_j := \{x \in \mathbb{R}^d / 2^{j-1} \leq |x| \leq 2^j\}$. Soit maintenant $s \in \mathbb{R}$. Alors, on définit l'espace $B_s(\mathbb{R}^d)$ comme l'ensemble des fonctions $u \in L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^d)$ telles que,*

$$\|u\|_{B_s} := \sum_{j=-1}^{+\infty} 2^{js} \left(\int_{C_j} |u(x)|^2 dx \right)^{1/2} < +\infty. \quad (4.33)$$

Le dual B_{-s}^* de B_s est défini par sa norme,

$$\|u\|_{B_{-s}^*} := \sup_{j \geq -1} 2^{js} \left(\int_{C_j} |u(x)|^2 dx \right)^{1/2} < +\infty. \quad (4.34)$$

On introduit enfin l'espace $L_s^2(\mathbb{R}^d)$ par,

$$\|u\|_{L_s^2} := \left(\int_{\mathbb{R}^d} (1+x^2)^s |u(x)|^2 ds \right)^{1/2}. \quad (4.35)$$

L'usage des espaces B_s , qui sont des espaces de type L^2 à poids, est très classique dans l'analyse de l'opérateur d'Helmholtz, et en théorie du scattering quantique. Il repose sur le fait simple suivant : pour un indice de réfraction constant (pour tout x , $n(x) = n_0$ avec $n_0 \neq 0$), la résolvante $(\Delta_x + n_0^2 + i0)^{-1}$ est continue de $B_{1/2}$ dans $B_{-1/2}^*$. Nous renvoyons à [AH], et plus récemment à [PV] pour l'estimation correspondante dans le cas d'indices variables.

Avec ces notations, nos résultats sont les suivants,

Théorème 4.2 (cas d'une source ponctuelle) ([15])

Soit u^ε la solution de (4.1) avec second membre donné par (4.3). Soit f^ε la transformée de Wigner de u^ε , donnée par (4.5). Soit enfin w^ε définie par (4.23). On suppose :

• $\nabla n^2(x)$ est une fonction continue qui appartient à L_N^2 pour un N suffisamment grand, et telle que la partie négative $(x \cdot \nabla n^2(x))_-$ est “petite” (voir [PV] et [15]). De plus, pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, $0 < n_{\min} \leq n(x) \leq n_{\max}$.

• $S \in L_N^2$ pour un N suffisamment grand.

Alors,

(i) w^ε et u^ε sont uniformément bornées dans $B_{-1/2}^*$. Également, f^ε est bornée dans un espace de distributions.

(ii) (condition de radiation) la solution w^ε de (4.25) converge faiblement vers w , solution de (4.26) dans les trois cas suivants : (a) $n(x)$ est une fonction radiale décroissante, (b) $n(x)$ est de la forme $n_0(x) + c_0$ où c_0 est une constante réelle, et $n_0(x)$ est un profil fixe, auquel cas la convergence $w^\varepsilon \rightarrow w$ a lieu pour presque tout c_0 , (c) $n(x)$ est une constante.

(iii) Sous l'hypothèse que w^ε converge faiblement vers w , la suite f^ε converge faiblement vers une mesure localement finie $f(x, \xi)$ solution de (4.8). La condition de radiation pour f est satisfaite faiblement, dans le sens suivant : pour tout $R(x, \xi) \in C_c^\infty(\mathbb{R}^{2d} \setminus \{\xi = 0\})$, et toute solution $g(x, \xi)$ de $-0g + \xi \cdot \nabla_x g = R$, on a,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^{2d}} f(x, \xi) R(x, \xi) dx d\xi = & \quad (4.36) \\ & - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \frac{1}{2} \nabla_x n^2(x) \cdot \nabla_\xi g(x, \xi) f(x, \xi) dx d\xi + \int_{\mathbb{R}^{2d}} Q_1(x, \xi) g(x, \xi) dx d\xi. \end{aligned}$$

Remarque 4.2

1- Les hypothèses faites sur n dans le Théorème 4.2 sont très faibles, dans la mesure où elles ne permettent même pas de définir les rayons de l'optique géométrique (4.18). Elles proviennent du travail [PV], où il est montré qu'elles suffisent pour obtenir des bornes uniformes sur les opérateurs $(\Delta_x + n^2(x) + i\alpha)^{-1}$ de $B_{1/2}$ dans $B_{-1/2}^*$. Le Théorème 4.2 repose donc de manière essentielle sur les estimations obtenues dans [PV].

2- Dire que l'équation (4.8) est satisfaite faiblement signifie que l'égalité a lieu lorsqu'on la “teste” contre une fonction $g(x, \xi) \in C_c^\infty(\mathbb{R}^{2d})$. Le point (iii) du Théorème 4.2 indique que la même égalité a encore lieu lorsqu'on la teste contre des fonctions de la forme $g(x, \xi) = \int_0^{+\infty} R(x - \xi s, \xi) ds$, solution de $-0g + \xi \cdot \nabla_x g = R$, avec R comme ci-dessus. Une telle fonction g n'a pas la propriété de support compact, puisqu'elle est constante (non nulle) dans des demi-espaces de \mathbb{R}^{2d} .

Théorème 4.3 (cas d'une source surfacique) ([16])

Soit u^ε la solution de (4.1) avec second membre donné par (4.4). Soit f^ε la transformée de Wigner de u^ε , donnée par (4.5). Soit enfin, pour tout $y \in \Gamma$, w_y^ε définie par (4.28).

On suppose :

- l'indice de réfraction est constant, c'est-à-dire, $n(x) = n_0 \neq 0$, pour tout $x \in \mathbb{R}^d$.
- la surface Γ est une variété affine.
- $S \in L_N^2$ pour un N suffisamment grand. L'amplitude A et la phase ϕ sont régulières, et A est à support compact.

Alors,

(i) w_y^ε est bornée dans $B_{-(p+1)/2}^*$, uniformément par rapport à y et ε . Conséquent, f^ε est bornée dans un espace de distributions.

(ii) dans le régime propagatif (voir Théorème 4.1), la suite f^ε converge faiblement vers une mesure localement finie $f(x, \xi)$ solution de (4.12). La condition de radiation pour f est satisfaite faiblement, dans le sens du Théorème 4.2. Des énoncés analogues ont lieu dans le cas résonnant et le cas caractéristique.

Remarque 4.3

1- Le Théorème 4.3 est limité au cas d'un indice constant. Comme on l'a dit, cette hypothèse correspond à une difficulté profonde. En revanche, l'hypothèse que Γ est une variété affine, qui simplifie grandement la géométrie du problème, peut être levée, au prix d'une analyse géométrique plus fine. C'est l'objet d'un travail en cours avec O. Runborg [17].

2- La régularité $B_{-(p+1)/2}^*$ sur w_y^ε est optimale.

3- l'hypothèse de support compact sur A , qui signifie que la source \mathcal{S}_ε est elle-même localisée, est naturelle.

Esquisse de preuve des Théorèmes 4.2 et 4.3

Première étape (source ponctuelle) : obtention de bornes sur $u^\varepsilon, w^\varepsilon, f^\varepsilon$

Les estimations uniformes de [PV] donnent immédiatement, grâce à l'homogénéité de l'équation (4.1) avec source ponctuelle (4.3), que u^ε et w^ε sont uniformément bornées dans $B_{-1/2}^*$.

Pour en déduire une borne sur f^ε , on écrit, par définition de f^ε (4.5), et pour une fonction test $\psi(x, \xi) \in C_c^\infty$,

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} f^\varepsilon(x, \xi) \psi(x, \xi) dx d\xi = \int_{\mathbb{R}^{2d}} u^\varepsilon \left(x + \varepsilon \frac{y}{2} \right) \overline{u^\varepsilon \left(x - \varepsilon \frac{y}{2} \right)} \widehat{\psi}(x, y) dx dy . \quad (4.37)$$

Ici, $\widehat{\psi}$ désigne la transformée de Fourier de ψ dans la variable ξ . On observe maintenant que la borne $B_{-1/2}^*$ sur u^ε fournit une borne L^2 à poids sur u^ε ($u^\varepsilon \in L_{-1/2-\delta}^2$ pour tout $\delta > 0$). On découpe alors l'intégration en (x, y) dans (4.37) suivant les tailles respectives de x et de εy . Dans chaque zone, on utilise la borne L^2 à poids sur u^ε . Ceci permet de borner le second membre de (4.37) indépendamment de ε , grâce à une norme fixe de ψ . Il en résulte que f^ε est bornée dans un espace de distribution que nous ne décrivons pas ici.

L'idée de borner par un procédé de dualité la transformée de Wigner de fonctions de type L^2 remonte à [LP].

Deuxième étape (source ponctuelle) : conclusion

Nous renvoyons à [15] pour la preuve du point (ii) du Théorème 4.2, et nous nous concentrons sur l'énoncé (iii).

Comme indiqué dans la remarque 4.2, la difficulté principale dans la preuve du point (iii) réside dans l'établissement de la condition de radiation sous sa forme faible (4.36). Pour cela, on commence par tester effectivement f^ε contre une fonction $R(x, \xi)$ comme dans l'énoncé du Théorème 4.2. On utilise que f^ε satisfait l'équation (4.20), et on procède par dualité. On cherche alors à passer directement à la limite dans la formulation duale de (4.20) ainsi obtenue, avec le but d'obtenir (4.36) lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$.

Pour l'essentiel, la difficulté principale consiste à montrer la convergence,

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} Q_\varepsilon(x, \xi) g_\varepsilon(x, \xi) dx d\xi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^{2d}} Q_1(x, \xi) g(x, \xi) dx d\xi , \quad (4.38)$$

où g est comme dans le Théorème 4.2, et g_ε satisfait,

$$-\alpha_\varepsilon g_\varepsilon + \xi \cdot \nabla_x g_\varepsilon = R. \quad (4.39)$$

(Alternativement, $g_\varepsilon(x, \xi) = \int_0^{+\infty} \exp(-\alpha_\varepsilon s) R(x - \xi s, \xi) ds$). Pour simplifier encore un peu, on est ramené ainsi à borner, indépendamment de ε , des intégrales du type (4.37) avec ψ remplacée par g_ε . Il est important de noter qu'une telle borne est *fausse* si l'on remplace directement ψ par g dans (4.37), car g ne présente aucune décroissance dans certaines régions de l'espace. Ce défaut de décroissance est en revanche compensé par le facteur d'amortissement exponentiel $-\alpha_\varepsilon g_\varepsilon$ de (4.39). C'est là qu'apparaît la contrainte technique $\alpha_\varepsilon \geq \varepsilon^\gamma$ de (4.2), qui dit que α_ε ne peut pas être "trop petit". En utilisant judicieusement ce fait, et en utilisant une nouvelle fois les bornes L^2 à poids sur u^ε , on peut appliquer les méthodes de la première étape et conclure.

Troisième étape (source surfacique) : obtention de bornes sur w_y^ε

L'obtention de bornes sur w_y^ε constitue la difficulté principale du Théorème 4.3. On se limite ici au régime propagatif.

L'analyse formelle du paragraphe 4.2 indique que, dans la limite où $\varepsilon \rightarrow 0$, w_y^ε se comporte comme,

$$\widehat{w}_y^\varepsilon(\xi) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} A(y) \widehat{S}(\xi) \delta(\xi_y^\tau - \nabla^t \phi(y)) \frac{1}{n_0^2 - \xi^2 + i0}. \quad (4.40)$$

(voir (4.32)). L'hypothèse que Γ est une variété affine permet d'abord de préciser l'asymptotique (4.40) de manière quantitative. L'obtention de bornes sur w_y^ε repose dès lors sur le traitement de la double singularité en $\xi^2 = n_0^2$ et $\xi_y^\tau = \nabla^t \phi(y)$ dans (4.40).

L'hypothèse de régime propagatif affirme que les surfaces $\{\xi^2 = n_0^2\}$ (qui est une sphère) et $\{\xi_y^\tau = \nabla^t \phi(y)\}$ (qui est une variété affine de dimension p) s'intersectent *transversalement*. On distingue donc naturellement, dans (4.40), les valeurs de ξ suivant que ξ est "loin" ou "près" de l'une ou l'autre de ces surfaces, et le cas le "pire" étant celui où ξ est "près" de l'*intersection* de ces dernières. L'hypothèse de transversalité permet alors de se placer localement dans un nouveau repère, de coordonnées notées par Ξ , où la sphère est décrite par l'équation $\Xi_1 = 0$, et l'autre surface est $\Xi_2 = \dots = \Xi_{p+1} = 0$. Dans ce repère local, w_y^ε se comporte comme,

$$\widehat{w}_y^\varepsilon(\Xi) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} A(y) \widehat{S}(\Xi) \delta(\Xi_2) \cdots \delta(\Xi_{p+1}) \frac{1}{\Xi_1 + i0}. \quad (4.41)$$

L'obtention de bornes uniformes sur w_y^ε est donc ramenée à la question suivante : pour une régularité donnée de \widehat{S} , quelle est la régularité, dans la variable Ξ , du second membre de (4.41) ? En d'autres termes, il s'agit de montrer un Théorème de trace permettant d'assigner une certaine régularité à la trace de $\widehat{S}(\Xi)$, sur la surface $\Xi_1 = \Xi_2 = \dots = \Xi_{p+1} = 0$, de codimension $p+1$.

À ce stade, on adapte un argument dû à Agmon et Hörmander [AH], qui permet d'affirmer,

$$\left\| \mathcal{F}^{-1} \left(\widehat{S}(\Xi) \delta(\Xi_2) \cdots \delta(\Xi_{p+1}) \frac{1}{\Xi_1 + i0} \right) \right\|_{B_{-(p+1)/2}^*} \leq \|S\|_{B_{(p+1)/2}}. \quad (4.42)$$

Ici, \mathcal{F}^{-1} désigne la transformée de Fourier inverse. Ainsi, l'opération de "prise de trace", en variables de Fourier, sur des variétés linéaires de codimension $p + 1$, est continue de $B_{(p+1)/2}$ dans son dual. Par (4.41), w_y^ε possède donc, au moins localement et dans un repère adapté en variables de Fourier, la régularité $B_{-(p+1)/2}^*$. L'invariance des normes B , et B^* , par changement de repère et troncature (en variables de Fourier), permet alors de passer d'estimations locales de la forme (4.42), à une estimation globale sur w_y^ε , via les formules (4.40) et (4.41), et l'on a,

$$\left\| w_y^\varepsilon \right\|_{B_{-(p+1)/2}^*} \leq C, \quad (4.43)$$

où C est indépendante de y et ε .

Quatrième étape (source surfacique) : conclusion

De la borne (4.43) sur w_y^ε , et de la définition (4.28) de w_y^ε , on déduit aisément une borne uniforme sur u^ε dans $B_{-(p+1)/2}^*$. En procédant alors comme dans (4.37), on en déduit une borne uniforme sur f^ε dans un espace de distributions que nous n'écrivons pas.

Pour l'obtention de (4.12), on procède comme dans le cas d'une source ponctuelle (deuxième étape ci-dessus) : on utilise que f^ε satisfait (4.20), et on passe à la limite par dualité. Les difficultés sont essentiellement les mêmes que dans le cas d'une source ponctuelle. \square

5 Appendice : effets dispersifs dans les équations de Vlasov et de Schrödinger ([1], [2], [3], [4], [5], [6])

Nous regroupons ici en appendice l'essentiel des résultats obtenus dans le travail de thèse.

Les travaux [1] à [6] visent à approfondir l'analogie de structure entre l'équation de Schrödinger de la Mécanique Quantique et les équations cinétiques de la Mécanique Classique (équation de Vlasov), au-delà des limites déjà connues lorsque la constante de Planck \hbar tend vers 0 (limite semi-classique). Cette analogie repose sur les propriétés dispersives des deux équations, et permet d'exhiber des effets régularisants nouveaux dans les équation cinétiques, qui sont pourtant réversibles dans le temps. Plus précisément, on sait que l'équation de Schrödinger posée sur $\psi := \psi(t, x)$ ($t \in \mathbb{R}$, $x \in \mathbb{R}^N$),

$$i\hbar\partial_t\psi/\partial t = \hbar^2\Delta_x\psi + \text{non-linéarité} , \quad (5.1)$$

"converge" quand \hbar tend vers 0 vers l'équation de Vlasov posée sur $f(t, x, v)$ ($t \in \mathbb{R}$, $(x, v) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$),

$$\partial f/\partial t + v \cdot \nabla_x f = \text{non-linéarité} , \quad (5.2)$$

(voir [LP], [GMMP]). Ces deux équations ont en apparence des structures très différentes, l'opérateur $i\hbar\partial_t - \hbar^2\Delta_x$ tendant à générer des oscillations de la fonction d'une variable d'espace $\psi(t, x) \in L^2(x)$, quand l'opérateur $\partial_t + v \cdot \nabla_x$ incite à regarder des phénomènes de transport selon le flot d'un Hamiltonien pour la fonction de deux variables d'espace et de vitesse $f(t, x, v) \in L^1(x, v)$. Néanmoins, grâce aux propriétés communes de dispersion de ces deux équations, mon objectif est d'éclairer en quoi celles-ci peuvent être étudiées à l'aide d'outils très semblables, et d'en déduire des résultats nouveaux tant au niveau Schrödinger qu'au niveau cinétique, comme je le décris ci-dessous. Il est à noter que ce point de vue a déjà été adopté dans de nombreux travaux, parmi lesquels on peut citer [LPe1], [Col].

Dans un premier travail ([1], [2]), je considère un système infini d'équations de Schrödinger non-linéaires couplées. Ce système décrit, au niveau quantique, l'évolution d'un ensemble de particules chargées soumises à l'interaction coulombienne avec les particules voisines ; il est fréquemment utilisé pour la modélisation des phénomènes quantiques dans les semi-conducteurs. Ici, la fonction d'onde $\psi(t, x)$ prend ses valeurs dans un espace de Hilbert de dimension infinie. Dans ce modèle, je démontre d'abord l'existence et l'unicité d'une solution pour le problème de Cauchy dans un cadre L^2 (les particules ont une masse totale finie), améliorant ainsi la théorie H^1 (énergie cinétique finie) développée dans [ILZ], [Arn]. Ce travail fait appel à des résultats connus dans le cas où ψ prend ses valeurs dans \mathbb{C} ([Cz], [GV]), et nécessite une estimation de type Strichartz sur les fonctions ψ à valeurs Hilbert ($\psi \in l^2(\mathbb{C})$). Cette estimation constitue la principale difficulté de l'article, et utilise des outils d'analyse harmonique et d'interpolation. Puis je démontre divers effets régularisants, ainsi que diverses estimations de décroissance de $\psi(t, x)$ quand $t \rightarrow \infty$. Dans ces effets régularisants, j'estime en particulier l'explosion des normes "plus régulières" lorsque $t \rightarrow 0$. Le point clé dans tous ces résultats est le caractère dispersif de l'opérateur de Schrödinger libre $\partial_t - i\Delta_x$, donné par la décroissance explicite en temps de certaines normes liées à cet opérateur.

Ce travail, valable au niveau Schrödinger, pose naturellement deux questions lorsque l'on fait l'analogie semi-classique (Cf (5.1)-(5.2)) : que deviennent les inégalités de Strichartz au niveau cinétique (équation de Vlasov) ? Qu'advient-il des effets régularisants ci-dessus lorsque $\hbar \rightarrow 0$?

La première question est l'objet d'un article en collaboration avec B. Perthame ([3]). Soit en effet $f^0(x, v) \in L^a(x, v)$ pour un $a > 1$, et $f(t, x, v)$ la solution de l'équation de Vlasov linéaire avec donnée initiale f^0 :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = 0 . \quad (5.3)$$

On a la formule explicite $f(t, x, v) = f^0(x - vt, v)$, et la seule borne *a priori* évidente sur f est alors : $\|f(t, x, v)\|_{L^a(x, v)} \leq \|f^0(x, v)\|_{L^a(x, v)}$. Néanmoins nous montrons le résultat suivant : la densité $\rho^0(t, x) := \int f^0(x - vt, v) dv$ appartient à l'espace $L^q(t; L^p(x))$ pour certains exposants q et p ($p > 1$). La difficulté est que cette densité n'est pas définie pour tout t , mais seulement presque partout. Notons que cette estimation remarquable, bien qu'elle semble liée aux Lemmes de Moyenne ([DPLM]), aux effets dispersifs ([LPe1]), et aux estimations de Strichartz valables au niveau quantique ([Cz], [1], [2], [GV]), est en fait indépendante de tous ces outils. Là encore, c'est le caractère dispersif de l'opérateur de transport libre $\partial_t + v \cdot \nabla_x$ qui est à la base de ces estimations.

Pour répondre à la deuxième question, je considère dans [4] l'équation de Vlasov-Poisson, limite semi-classique du système de Schrödinger décrit plus haut. Il s'écrit, en dimension 3 d'espace ($t \in \mathbb{R}$, $(x, v) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$) :

$$\begin{cases} \partial_t f(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f - \nabla_x V(t, x) \cdot \nabla_v f = 0 , \\ \text{avec : } V(t, x) = \pm \frac{1}{|x|} *_x \rho(t, x) , \\ \text{et : } \rho(t, x) = \int_v f(t, x, v) dv , \end{cases} \quad (5.4)$$

pour la donnée initiale $f^0(x, v) \in L^1 \cap L^\infty(x, v)$. De manière standard, la résolution de ce problème non-linéaire se ramène à l'obtention de bornes L_x^p sur la densité $\rho(t, x)$ pour certains exposants $p > 1$, en fonction de l'inconnue f . Comme dans (5.3), la seule borne évidente est $f(t, x, v) \in L^\infty(t; L^1 \cap L^\infty(x, v))$, ce qui ne fournit guère mieux que $\rho(t, x) \in L^\infty(t; L_x^1)$. L'outil classiquement utilisé pour palier à ce défaut repose alors sur la conservation de l'énergie, qui fournit une borne sur la quantité $\int_{x, v} v^2 f(t, x, v) dx dv$ (énergie cinétique) et permet de déduire des estimations du type : $\|\rho(t, x)\|_{L_x^p} \leq Cste$, pour certains $p > 1$. La quantité $\int v^2 f$ est l'analogue de la norme H^1 au niveau de l'équation de Schrödinger. Par analogie avec le cas quantique (Cf [1], [2]), je montre dès lors dans [4] comment l'on peut se débarrasser de l'hypothèse d'énergie cinétique finie dans l'équation de Vlasov-Poisson. Plus précisément, si la donnée initiale $f^0(x, v)$ possède des moments dans la seule variable d'espace : $\int |x|^m f^0(x, v) dx dv < \infty$ pour un $m \geq 0$, je montre que l'on peut construire une solution $f(t, x, v)$ qui satisfait $X_m(t) = \int_{x, v} |x - vt|^m f(t, x, v) dx dv < \infty$ pour tout temps t (propagation des moments en espace). On en déduit immédiatement des estimations singulières en temps, du type : $\|\rho(t, x)\|_{L_x^p} \leq C \cdot t^{-\delta}$ au voisinage de $t = 0$ (effet régularisant), pour certains $p > 1$ et $\delta > 0$. Physiquement, les particules d'énergie cinétique trop grande "partent à l'infini" de manière instantanée, ce qui régularise le problème. La difficulté dans cette analyse est bien sûr de résoudre le problème de Cauchy alors que toutes les normes "explosent" à l'instant initial, et l'estimation clé de ce travail

est en effet une estimation de Gronwall dans un cas "limite",

$$\frac{d}{dt} X_m(t) \leq C \cdot t^{-1+\epsilon} \cdot X_m(t) \log X_m(t) ,$$

pour un certain $\epsilon > 0$. A cet égard, ce travail se situe dans le prolongement naturel des résultats fondamentaux de P.L. Lions et B. Perthame [LPe2], où un problème de propagation de moments est traité dans le cas régulier d'énergie cinétique finie, et de B. Perthame [Pe] où une solution singulière de Vlasov-Poisson est exhibée à l'aide d'une loi de conservation spécifique pour la quantité $X_2(t)$.

Là encore, c'est la structure dispersive de l'opérateur de transport $\partial_t + v \cdot \nabla_x$ qui est à la base de ces estimations, et il est naturel dès lors de chercher à exhiber des effets régularisants semblables dans des cas où l'opérateur de transport est perturbé. Ainsi, le travail ci-dessus est étendu dans [5], où je construis des solutions singulières (énergie cinétique infinie) du système de Vlasov-Poisson-Fokker-Planck (VPFP), où apparaissent des termes perturbateurs de Laplacien en vitesse et de friction. Ce système s'écrit,

$$\partial_t f(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f - \operatorname{div}_v(vf) - \nabla_x V(t, x) \cdot \nabla_v f - \Delta_v f = 0 , \quad (5.5)$$

et le potentiel V est donné par l'équation de Poisson comme dans (5.4). Cette équation décrit l'évolution classique d'un ensemble d'électrons en interaction Coulombienne (comme le système de Vlasov-Poisson) où interviennent de plus des collision aléatoires entre électrons (terme de diffusion $-\Delta_v$). Celles-ci ont pour effet de mieux répartir les vitesses des électrons. Je montre là un effet régularisant beaucoup plus fort que dans l'équation de Vlasov-Poisson ci-dessus, dans l'esprit des travaux de F. Bouchut sur le système VPFP avec énergie cinétique finie [Bou]. La nouveauté dans ce résultat consiste d'abord à dériver une loi de conservation originale sur un certain moment de f , analogue aux quantités $X_m(t)$ invoquées plus haut. On en déduit des estimations du type : $\|\rho(t, x)\|_{L_x^p} \leq C \cdot t^{-\delta}$ au voisinage de $t = 0$, pour p variant entre certaines bornes *finies*, et ces estimations traduisent un effet de dispersion par le terme de transport $\partial_t + v \nabla_x$. Puis l'on exploite l'hypoellipticité de l'opérateur de Fokker-Planck $v \cdot \nabla_x - \Delta_v$ (Cf [Hö2]), ce qui permet, comme dans [Bou], d'obtenir des estimations L^∞ et même Hölder sur la densité macroscopique ρ . Il est à noter que l'obtention d'une telle borne L^∞ est un point crucial dans ce type d'équations.

Une synthèse sur les travaux présentés ci-dessus est faite dans [6].

6 Travaux de l'auteur ou en collaboration, classés par thèmes

1- Questions de régularisation par effet dispersif dans des équations de type Schrödinger ou Vlasov

[1] F. Castella, *L^2 -solutions to the Schrödinger-Poisson System : Existence, Uniqueness, Time Behaviour, and Smoothing Effects*, Math. Mod. Meth. Appl. Sci., Vol. 7, N. 8, pp. 1051-1083 (1997).

[2] F. Castella, *L^2 -solutions to the Schrödinger-Poisson System : Existence, Uniqueness, Time Behaviour, and Smoothing Effects*, C. R. Acad. Sci., t. 323, sér. I, p. 1243-1248 (1996).

La note [2] est une annonce de [1].

[3] F. Castella, B. Perthame, *Estimations de Strichartz pour les Equations de transport Cinétique*, C. R. Acad. Sci. Paris, t. 322, Série I, p. 535-540 (1996).

La note [3] est un travail à part entière et ne fera pas l'objet d'une publication ultérieure.

[4] F. Castella, *Propagation of space moments in the Vlasov-Poisson Equation and further results*, Ann. I.H.P., Anal. NonLinéaire, Vol. 16, N. 4, p. 503-533 (1999).

[5] F. Castella, *The Vlasov-Poisson-Fokker-Planck System with infinite kinetic energy*, Indiana Univ. Math. J., Vol. 47, N. 3. p. 939-964 (1998).

[6] F. Castella, *Effets dispersifs dans les équations de Schroedinger et de Vlasov*, Séminaire E.D.P., École Polytechnique, Exp. No. XXIV, 14 pp., 1997-1998.

Le texte [6] constitue un article de synthèse des travaux [1] à [5].

2- Sur la convergence de l'équation de Von Neumann vers l'équation de Boltzmann

[7] F. Castella, *On the derivation of a Quantum Boltzmann Equation From the periodic Von-Neumann equation*, Math. Mod. An. Num. Vol. 33, N. 2, pp. 329-350 (1999).

[8] F. Castella, P. Degond, *Convergence de l'équation de Von Neumann vers l'équation de Boltzmann Quantique dans un cadre déterministe*, C. R. Acad. Sci., t. 329, sér. I, pp. 231-236 (1999).

La note [8] annonce une forme plus faible du résultat présenté dans [9].

[9] F. Castella, *From the Von Neumann equation to the Quantum Boltzmann equation in a deterministic framework*, J. Stat. Phys., Vol. 104, N. 1/2, pp. 387-447 (2001).

[10] F. Castella, *From the Von-Neumann equation to the Quantum Boltzmann equation II: identifying the Born series*, 19 pp., à paraître dans J. Stat. Phys. (2002).

[11] F. Castella, A. Plagne, *Non-derivation of the Quantum Boltzmann equation from the periodic Von-Neumann equation*, 49 pp., Preprint soumis (2001).

[12] F. Castella, A. Plagne, *A distribution result for slices of sums of squares*, Math. Proc. Cambridge Philos. Soc., Vol. 132, N.1, pp. 1-22 (2002).

[13] F. Castella, *Résultats de convergence et de non-convergence de l'équation de Von Neumann périodique vers l'équation de Boltzmann quantique*, Séminaire E.D.P., École Polytechnique, exposé N. XXI, 18 pp., 1999-2000.

Le texte [13] constitue un article de synthèse des travaux [7] à [12].

3- Convergence d'une équation de Von Neumann vers une équation de type Fokker-Planck

[14] F. Castella, L. Erdős, F. Frommlet, P.A. Markowich, *Fokker-Planck equations as Scaling limits of Reversible Quantum Systems*, J. Statist. Phys., Vol. 100, no. 3-4, pp. 543-601 (2000).

4- Analyse haute-fréquence de l'équation d'Helmholtz

[15] J.D. Benamou, F. Castella, Th. Katsaounis, B. Perthame, *High frequency limit in the Helmholtz equation*, 27 pp., à paraître dans Rev. Mat. Iberoam. et Séminaire E.D.P., École Polytechnique, exposé N. V, 27 pp., 1999-2000.

[16] F. Castella, B. Perthame, O. Runborg, *High frequency limit of the Helmholtz equation II: source on a general smooth manifold*, 49 pp., à paraître dans Comm. P.D.E. (2001).

[17] F. Castella, O. Runborg, extension des résultats de [16], travail en cours.

7 Bibliographie

- [AH] S. Agmon, L. Hörmander, *Asymptotic Properties of Solutions of Differential Equations with Simple Characteristics*, J. Analyse Math., Vol. 30, pp. 1-38 (1976).
- [Ar] A. Arai, *Long-time behaviour of an electron interacting with a quantized radiation field*, J. Math. Phys., Vol. 32, N. 8, p. 2224-2242 (1991).
- [Arn] A. Arnold, *Self-consistent relaxation-time models in quantum mechanics*, Comm. PDE, Vol. 21, 473-506 (1996).
- [ALMS] A. Arnold, J.L. Lopez, P.A. Markowich, J. Soler, *An Analysis of Quantum Fokker-Planck Models: A Wigner Function Approach*, Preprint (2000).
- [BGC] C. Bardos, F. Golse, J.F. Colonna, *Diffusion approximation and hyperbolic automorphisms of the torus*, Phys. D, Vol. 104, N. 1, pp. 32-60 (1997).
- [Be] J.D. Benamou, *Direct computation of multivalued phase space solutions for Hamilton-Jacobi equations*, Comm. Pure Appl. Math., Vol. 52, N. 11, pp. 1443-1475 (1999).
- [BS] J.D. Benamou, I. Sollic, *An Eulerian method for capturing caustics*, J. Comput. Phys., Vol. 162 N. 1, pp. 132-163 (2000).
- [BG] S. Boatto, F. Golse, *Diffusion approximation of a model Knudsen gas : dependence of the diffusion constant upon the boundary condition*, Preprint (2001).
- [Boh] A. Bohm, **Quantum Mechanics**, Texts and monographs in Physics, Springer-Verlag (1979).
- [BBS] C. Boldrighini, L.A. Bunimovich, Ya. Sinai, *On the Boltzmann equation for the Lorentz gas*, J. Stat. Phys., Vol. 32, N. 3, p. 477-501 (1983).
- [Bou] F. Bouchut, *Smoothing effect for the non-linear Vlasov-Poisson-Fokker-Planck System*, J. Diff. Eq., 122, 225-238 (1995).
- [Bo1] J. Bourgain, *Fourier transform restriction phenomena for certain lattice subsets and applications to non-linear evolution equations. Part I: Schrödinger equations*, Geom. Funct. Anal., Vol. 3, pp. 107-156 (1993).
- [Bo2] J. Bourgain, *Exponential sums and nonlinear Schrödinger equations*, Geom. Funct. Anal., Vol. 3, pp. 157-178 (1993).
- [BGW] J. Bourgain, F. Golse, B. Wennberg, *On the distribution of free path lengths for the periodic Lorentz gas*, Comm. Math. Phys., Vol. 190, p. 491-508 (1998).
- [Boy] R.W. Boyd, **Nonlinear Optics**, Academic Press (1992).
- [BR] O. Bratteli, D.W. Robinson, **Operator algebras and quantum-statistical mechanics**, Texts and Monographs in Physics, Springer-Verlag, New York-Berlin (1981)
- [Bu] N. Burq, *Mesures semi-classiques et mesures de défaut*, Sémin. Bourbaki, Vol. 1996/97. Astérisque N. 245, Exp. N. 826, 4, pp. 167-195 (1997).
- [CL1] A.O. Caldeira, A.J. Leggett, *Path-integral approach to quantum Brownian motion*, Physica A, Vol. 121, 587-616 (1983). Erratum: ibid. Vol. 130, p. 374 (1985).
- [CL2] A.O. Caldeira, A.J. Leggett, *Quantum tunnelling in a dissipative system*, Ann. Phys., Vol. 149, p. 374-456 (1983).
- [Ck] D. Calecki, Lecture, University Paris 6 (1997).
- [CR] F. Castella, O. Runborg, travail en cours.
- [Cz] T. Cazenave, *An introduction to nonlinear Schrödinger Equations*, Second Edition, Textos de Métodos Matemáticas 26, Universidade Federal do Rio de Janeiro (1993).
- [CIP] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti, **The mathematical theory of dilute**

- gases, Applied Mathematical Sciences, Vol. 106, Springer-Verlag, New York (1994).
- [CLL] Y.-C. Chen, J. L. Lebowitz and C. Liverani, *Dissipative quantum dynamics in a boson bath*,
- [CTDL] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, **Mécanique Quantique**, I et II, Enseignement des Sciences, Vol. 16, Hermann (1973).
- [CTDRG] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg, **Processus d'interaction entre photons et atomes**, "Savoirs actuels", Interditions/Editions du CNRS (1988).
- [Col] Th. Colin, *Smoothing effects for dispersive equations via a generalized Wigner transform*, Siam J. Math. Anal., Vol. 25, No 6, pp 1622-1641 (1994).
- [Co] M. Combescot, *Is there a generalized Fermi Golden Rule?*, Preprint (1999).
- [De] H. Dekker, *Multilevel tunneling and coherence: dissipative spin-hopping dynamics at finite temperatures*, Phys. Rev. A, Vol. 44, N. 4, p. 2314-2323 (1991).
- [Di1] L. Diosi, *On High-Temperature Markovian Equation for Quantum Brownian Motion*, Europhys. Lett., Vol. 22, N. 1, p. 1-3 (1993).
- [Di2] L. Diosi, *Caldeira-Leggett master equation and medium temperatures*, Phys. A, Vol. 199, p. 517-526 (1993).
- [DPLM] R.J. Di Perna, P.L. Lions, Y. Meyer, *L^p regularity of velocity averages*, Ann. IHP, Anal. Nonlinéaire, Vol. 8, N. 3-4, 271-187 (1991).
- [Dü] R. Dümcke, *The low density limit for an N -level system interacting with a free Bose or Fermi gas*, Comm. Math. Phys., Vol. 97, N. 3, pp. 331-359 (1985).
- [EY1] L. Erdős, H.T. Yau, *Linear Boltzmann Equation as Scaling Limit of Quantum Lorentz Gas* Advances in differential equations and mathematical physics (Atlanta, GA, 1997), pp. 137-155, Contemp. Math., 217, Amer. Math. Soc., Providence, RI (1998).
- [EY2] L. Erdős, H.T. Yau, *Linear Boltzmann equation as the weak coupling limit of a random Schrödinger equation*, Comm. Pure Appl. Math., Vol. 53, N. 6, pp. 667-735 (2000).
- [FH] R.P. Feynman, A. Hibbs, **Quantum Mechanics and Path Integrals**, McGraw Hill, New York (1965).
- [FV] R.P. Feynman, F.L. Vernon, *The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system*, Ann. Phys., Vol. 24, p. 118-173 (1963).
- [FLM] W. Fischer, H. Leschke, P. Müller, *On the averaged quantum dynamics by white-noise Hamiltonian with and without dissipation*, Ann. Physik, Vol. 7, p. 59-100 (1998).
- [Fi] M.V. Fischetti, *Theory of electron transport in small semiconductor devices using the Pauli master equations*, J. Appl. Phys., Vol. 83, N. 1, pp. 270-291 (1998).
- [GN] C. Gérard, F. Nier, *Scattering theory for the perturbations of periodic Schrödinger operators*, J. Math. Kyoto Univ., Vol. 38, N. 4, pp. 595-634 (1998).
- [Ge] P. Gérard, *Microlocal defect measures*, Comm. Partial Differential Equations, Vol. 16, N. 11, pp. 1761-1794 (1991).
- [GL] P. Gérard, E. Leichtnam, *Ergodic properties of eigenfunctions for the Dirichlet problem*, Duke Math. J., Vol. 71, pp. 559-607 (1993).
- [GMMP] P. Gérard, P.A. Markowich, N.J. Mauser, F. Poupaud, *Homogenization limits and Wigner transforms*, Comm. Pure Appl. Math., Vol. 50, N. 4, pp 323-379, (1997).
- [GV] J. Ginibre, G. Velo, *The global Cauchy problem for some nonlinear Schrödinger equation revisited*, Ann. Inst. H. Poincaré, Analyse nonlinéaire 2, 309-327 (1985).
- [Gr] E. Grosswald, **Representation of integers as sums of squares**, Springer Verlag (1985).

- [HR] F. Haake, R. Reibold, *Strong-Damping and low-temperature anomalies for the harmonic oscillator*, Phys. Rev. A, Vol. 32, N. 4, p. 2462-2475 (1985).
- [Ha] Z. Haba, *Classical limit of quantum dissipative systems*, Lett. Math. Phys., Vol 44, p. 121-130 (1998).
- [HLW] T.G. Ho, L.J. Landau, A.J. Wilkins, *On the weak coupling limit for a Fermi gas in a random potential*, Rev. Math. Phys., Vol. 5, N. 2, p. 209-298 (1993).
- [Hö1] L. Hörmander, **The analysis of linear partial differential operators**, Springer-Verlag, Berlin (1994).
- [Hö2] L. Hörmander, *Hypoelliptic second order differential equations*, Acta Math., Vol. 119, 147-171 (1967).
- [Hu] K. Huang, **Statistical mechanics**, Wiley and Sons (1963).
- [ILZ] R. Illner, H. Lange, P. Zweifel, *Global existence, uniqueness and asymptotic behaviour of solutions of the Wigner-Poisson and Schrödinger systems*, Math. Meth. Appl. Sci., Vol.17, 349-376 (1994).
- [JP] V. Jakšić, C.-A. Pillet, *Spectral theory of thermal relaxation*, J. Math. Phys. Vol. 38, p. 1757-1780 (1997).
- [Ja] R. Jancel, **Foundations of Classical and Quantum Statistical Mechanics**, Pergamon, Braunschweig (1969).
- [KPR] J.B. Keller, G. Papanicolaou, L. Ryzhik, *Transport equations for elastic and other waves in random media*, Wave Motion, Vol. 24, N. 4, p. 327-370 (1996).
- [KL1] W. Kohn, J.M. Luttinger, Phys. Rev., Vol. 108, p. 590 (1957).
- [KL2] W. Kohn, J.M. Luttinger, Phys. Rev., Vol. 109, p. 1892 (1958).
- [Kr] H.J. Kreuzer, **Nonequilibrium thermodynamics and its statistical foundations**, Oxford Science Publications, Monographs on Physics and Chemistry of Materials (1983).
- [Ku] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap., Vol. 12 (1958).
- [Lab] M. Laborde, *Equirépartition des solutions du problème de Waring*, Conference on additive Number Theory, Univ. Bordeaux I, Talence 1978, pp. 91-109, et Séminaire Delange-Pisot-Poitou 76/77, Fasc. 2, Exp. 20 (1977).
- [La] L.J. Landau, *Observation of Quantum Particles on a Large Space-Time Scale*, J. Stat. Phys., Vol. 77, N. 1-2, pp. 259-309 (1994).
- [Lan] O.E. Lanford III, *Time evolution of large classical systems*, In Dynamical systems, theory and applications (Recontres, Battelle Res. Inst., Seattle, Wash., 1974), pp. 1-111. Lecture Notes in Phys., Vol. 38, Springer, Berlin (1975).
- [Li] G. Lindblad, *On the generators of Quantum dynamical semigroups*, Comm. Math. Phys., Vol. 48, pp. 119-130 (1976).
- [LP] P.L. Lions, Th. Paul, *Sur les mesures de Wigner*, Revista Mat. Iberoamericana, Vol. 9, p. 533-618 (1993).
- [LPe1] P.L. Lions, B. Perthame, *Lemmes de moments, de moyenne et de dispersion*, C. R. Acad. Sci. Paris, Vol. 314, 801-806 (1992).
- [LPe2] P.L. Lions, B. Perthame, *Propagation of moments and regularity for the 3-dimensional Vlasov-Poisson system*, Invent. Math., Vol. 105, 415-430 (1991).
- [Lo] R. Loudon, **The quantum theory of light**, Clarendon Press, Oxford (1991).
- [MRS] P.A. Markowich, C. Ringhofer, C. Schmeiser, **Semiconductor equations**, Springer-Verlag, Vienna (1990).
- [Mei] P. H. Meijer, **Quantum Statistical Mechanics**, Gordon and Breach Science Pub-

lishers (1966).

[Mi] L. Miller, *Refraction of high-frequency waves density by sharp interfaces and semi-classical measures at the boundary*, J. Math. Pures Appl., Sér. 9, Vol. 79, N. 3, pp. 227-269 (2000).

[NM] A. C. Newell, J. V. Moloney, **Nonlinear Optics**, Advanced Topics in the Interdisciplinary Mathematical Sciences, Addison-Wesley Publishing Company (1992).

[Ni1] F. Nier, *Asymptotic Analysis of a scaled Wigner equation and Quantum Scattering*, Transp. Theor. Stat. Phys., Vol. 24, N. 4 et 5, p. 591-629 (1995).

[Ni2] F. Nier, *A semi-classical picture of quantum scattering*, Ann. Sci. Ec. Norm. Sup., 4. Sér., t. 29, p. 149-183 (1996).

[Pa] W. Pauli, *Festschrift zum 60. Geburtstag A. Sommerfelds*, p. 30, Hirzel, Leipzig (1928).

[Pe] B. Perthame, *Time decay, Propagation of Low Moments and Dispersive Effects for Kinetic Equations*, Comm. PDE, Vol. 21, 659-686 (1996).

[PV] B. Perthame, L. Vega, *Morrey-Campanato Estimates for Helmholtz Equation*, J. Funct. Anal., Vol. 164, N. 2, pp. 340-355 (1999).

[PV] F. Poupaud, A. Vasseur, *Classical and quantum transport in random media*, Preprint (2001).

[Pr] I. Prigogine, **Non-Equilibrium Statistical Mechanics**, Interscience (1962).

[Ra] J. Rauch, **Lectures on Geometric Optics**, 124 pp.,
disponible à <http://www.math.lsa.umich.edu/~rauch>

[RS] M. Reed, B. Simon, **Methods of modern mathematical physics III – Scattering theory**, Academic Press, London (1979).

[Re] J. A. Reissland, **The Physics of Phonons**, Wiley Interscience (1972).

[SSL] M. Sargent, M. O. Scully, W. E. Lamb, **Laser Physics**, Addison – Wesley (1977).

[SDLL] P. de Smedt, D. Dürr, J. L. Lebowitz, C. Liverani, *Quantum system in contact with a thermal environment : rigorous* 231 (1988).

[Sp1] H. Spohn, *Derivation of the transport equation for electrons moving through random impurities*, J. Stat. Phys., Vol. 17 412 (1977).

[Sp2] H. Spohn, *Kinetic equations from Hamiltonian dynamics : Markovian limits*, Rev. Mod. Phys., Vol. 53, N. 3, pp. 569-615 (1980).

[Sp3] H. Spohn, **Large Scale Dynamics of interacting particles**, Springer, Berlin (1991).

[Ta] L. Tartar, *H-measures, a new approach for studying homogenisation, oscillations and concentration effects in* 4, pp. 193 – 230 (1990).

[UZ] W. G. Unruh, W. H. Zurek, *Reduction of a wave packet in quantum Brownian motion*, Phys. Rev. D, Vol. 40, N. 4, p. 1010-1094 (1989).

[VH1] L. Van Hove, *Physica*, Vol. 21 p. 517 (1955).

[VH2] L. Van Hove, *Physica*, Vol. 23 p. 441 (1957).

[VH3] L. Van Hove, *in Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, E. G. D. Cohen ed., p. 157 (1962).

[Vk] N. G. Van Kampen, **Stochastic processes in physics and chemistry**, *Lecture Notes in Mathematics*, North-Holland, Vol. 888 (1981).

[Va] R. C. Vaughan, **The Hardy – Littlewood method**, Cambridge Univ. Press (1981).

[Wil] M. Williams, *Boundary layers and glancing blow – up in nonlinear geometric optics*, Ann. Sci. École Norm. Sup., S 432 (2000).

[Wi] E. P. Wigner, *On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium*, Phys. Rev. Vol. 40, p. 749 – 759 (1932).

[Zh] B. Zhang, *Radiation condition and limiting amplitude principle for acoustic propagators with two unbounded media*, P 192 (1998).

[Zw] R. Zwanzig, **Quantum Statistical Mechanics**, P. H. E. Meijer ed., Gordon and Breach, New –

York(1966).