

N° d'Ordre : 2645

THÈSE

Présentée

DEVANT L'UNIVERSITÉ DE RENNES I

pour obtenir

le grade de DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE RENNES I

Mention : Mathématiques et Applications

par

Philippe ROUX

Institut de Recherche Mathématique de Rennes

École Doctorale MATISSE

U.F.R. de Mathématiques

TITRE DE LA THÈSE :

*La matrice de diffusion pour l'opérateur de Schrödinger
avec un potentiel électromagnétique à longue portée*

Soutenue le 21 Décembre 2001 devant la Commission d'Examen

COMPOSITION DU JURY :

Mr	Jean Ginibre	rapporteur
Mr	François Nicoleau	examinateur
Mr	Francis Nier	examinateur
Mr	Jean Nourrigat	rapporteur
Mr	Didier Robert	examinateur
Mr	Dimitri Yafaev	Directeur de thèse

“- *Qu'est-ce que vous faites dans la vie, vous ?*
demanda le professeur.

- *J'apprend des choses, dit Colin, et j'aime Chloé.*”

Boris Vian, *L'écume des jours*.

A Armelle et Sterenn ...

Table des matières

Table des matières	i
Liste des figures	iii
Remerciements	v
Introduction	1
1 Une expérience de diffusion	1
2 La théorie de la diffusion quantique	2
3 L'opérateur de Schrödinger, approche dépendante du temps	5
4 L'approche stationnaire	8
5 Les résultats principaux	11
6 L'effet Aharonov-Bohm	14
1 Préliminaires	19
1.1 Théorie de la diffusion abstraite	19
1.1.1 Théorie des perturbations lisses	19
1.1.2 Représentation stationnaire de la matrice de diffusion	21
1.1.3 La théorie de Mourre	24
1.2 Les opérateurs pseudodifférentiels	27
1.2.1 Les classes de Hörmander	27
1.2.2 Les classes de symboles oscillants	29
1.2.3 Restriction d'un opd à la sphère	34
1.3 L'opérateur de Schrödinger	42
1.3.1 Les hypothèses	42
1.3.2 La théorie de Mourre pour H	44
1.3.3 Principe d'absorption limite et estimation de radiation	47
1.3.4 Estimations de propagation microlocales	50
2 Théorie de la diffusion	59
2.1 Les opérateurs d'onde	59
2.1.1 Les équations eiconale et de transport	59
2.1.2 Existence et complétude asymptotique	64
2.1.3 Coïncidence avec l'approche dépendante du temps	70
2.2 La matrice de diffusion $S(\lambda; H, H_0)$	74
2.2.1 Construction de $S(\lambda; H, H_0)$	74

2.2.2	Analyse des singularités de $S(\lambda; H, H_0)$	78
2.2.3	La partie principale de $S(\lambda; H, H_0)$	83
2.3	Propriétés spectrales de $S(\lambda; H, H_0)$	87
2.3.1	Le spectre essentiel dans le cas $\rho < 1$	88
2.3.2	Le cas $\rho = 1$	90
2.3.3	La section efficace	96
APPENDICE : Le principe d'absorption limite pour H.		101
Notations		111
Bibliographie		113

Liste des figures

1	Une expérience de diffusion	2
2	Vision dynamique de la théorie de la diffusion	4
3	L'expérience d'Aharonov et Bohm	14
4	Exemples de champs magnétiques à support compact	16
1.1	Carte locale (\varkappa, Σ)	38
1.2	Les cônes tronqués $\Gamma_{\pm}(\theta, a)$	51
2.1	Le support de ζ_+	65
2.2	Calcul de \mathbf{V} pour le potentiel de Aharonov-Bohm en dimension 2	94
2.3	Calcul de \mathbf{V} pour le potentiel (2.3.20) en dimension 3	95

Remerciements

Tout au long de ces années j'ai pu bénéficier de l'attention, de l'aide ou du soutien de nombreuses personnes auxquelles je tiens à exprimer ma sympathie.

Je voudrais tout d'abord remercier Dimitri Yafaev de m'avoir donné la chance de faire cette thèse. Tout au long de ces quatre années il a su à la fois me laisser une grande liberté dans mon travail de recherche tout en veillant aux exigences de rigueur nécessaires à la concrétisation de mes efforts. Son encadrement et ses conseils m'ont beaucoup apporté bien au delà du simple point de vue mathématique.

Je tiens ensuite à remercier les membres du jury pour leur participation. En premier lieu Jean Ginibre et Jean Nourrigat qui ont accepté la lourde tâche d'être les rapporteurs de cette thèse. En plus de leur participation je remercie vivement Didier Robert et Francis Nier pour l'attention qu'ils ont portée sur mon travail. Mais je tiens à remercier tout particulièrement François Nicoleau ; les échanges d'idées que nous avons eu ont largement contribué à développer la dernière partie de cette thèse.

Durant ces quelques années j'ai pu bénéficier de l'expérience des membres de l'équipe EDP de l'IRMAR. Je pense en particulier à Nicolas Lerner qui n'a jamais été avare de son temps lorsque je frappais à son bureau pour lui poser mes nombreuses questions. Je leur adresse à tous ma profonde gratitude.

Je n'aurais pas pu finir cette thèse sans l'aide et le dynamisme des personnels de l'IRMAR depuis les bibliothécaires en passant par la reprographie, les secrétaires (Danielle Lanneau, Claude Boscher et Anita Texier) sans oublier les femmes de ménage qui n'ont jamais effacé le résultat d'un laborieux calcul entouré en rouge sur le tableau noir.

Je me dois de remercier Thierry Brault, Mouhamadou Seck et Paul Dirkx ainsi que tous mes collègues Lannionais pour le soutien chaleureux qu'ils m'ont apporté lors de ces derniers mois.

Je pense aussi à tous les autres enseignants, chercheurs ou thésards que j'ai côtoyés dans la "tour des maths", et plus globalement à tous mes amis. Les discussions que nous avons eu, scientifiques ou non, m'ont beaucoup appris. Je pense aux membres de l'association Jacques Binet et à ceux qui sont passés par le bureau 234 (pour y boire le fameux café qu'on y faisait) : Éric, Claude et Maël, Yannick, Rémi, Fred, Marc, Gilles, David, Yasmine, Ghislaine, François, Patricia, . . . , quelques (ex-)membres de la SAR : Olivier (les deux!), Franck, Yves, . . . , et tant d'autres . . .

Enfin j'ai une pensée émue pour ma famille et pour Charles mon grand père.

Introduction

D'un point de vue mathématique on peut dire que, grossièrement, la théorie de la diffusion est une branche de la théorie des perturbations des opérateurs auto-adjoints pour le spectre (absolument) continu. Cette théorie trouve ses origines en physique théorique, aussi bien dans le cadre de la mécanique classique que dans celui de la mécanique quantique, et plus particulièrement dans la description des collisions élastiques. Les principales problématiques étudiées ainsi qu'une grande partie du vocabulaire de la théorie de la diffusion sont en fait issus de la physique c'est pourquoi il convient de commencer cette thèse en décrivant, brièvement, une expérience de diffusion pour fixer quelques concepts importants.

1 Une expérience de diffusion

Un faisceau de particules d'énergie λ arrive de l'infini dans la direction $\omega_0 \in \mathbb{S}^{d-1}$ sur une cible fixe (le centre diffuseur) à raison de N particules par unité de temps et de surface (orthogonale à ω_0). Le flux de particules $d\phi$ passant dans l'élément de surface $|\mathbb{S}^{d-2}|b db d\varphi$, correspondant à un paramètre d'impact b , se trouve diffusé après interaction avec le centre diffuseur dans l'angle solide $d\omega = d\theta d\varphi$ dans la direction ω . Si le faisceau de particules est homogène et suffisamment peu dense (pour qu'on puisse négliger les interactions entre particules du faisceau) le flux sortant au travers de l'élément $d\omega$, mesuré par un détecteur, sera directement proportionnel à la densité du flux entrant N

$$d\phi = N \Sigma_{diff}(\omega, \omega_0; \lambda) d\omega. \quad (1)$$

En mécanique classique le facteur de proportionnalité vaut (voir Figure 1)

$$\Sigma_{diff}(\omega, \omega_0; \lambda) = |\mathbb{S}^{d-2}| \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|, \quad (2)$$

et est appelé section efficace différentielle. C'est la principale grandeur mesurable dans une telle expérience et elle est homogène à une surface[†]. On parle aussi parfois de la

[†]Dans le cas où le centre diffuseur est une sphère "dure" $\Sigma(\omega, \omega_0; \lambda) d\omega$ est égal à la surface que présente cette sphère face à la partie du flux entrant $d\phi$ qui repart dans la direction ω [LL64].

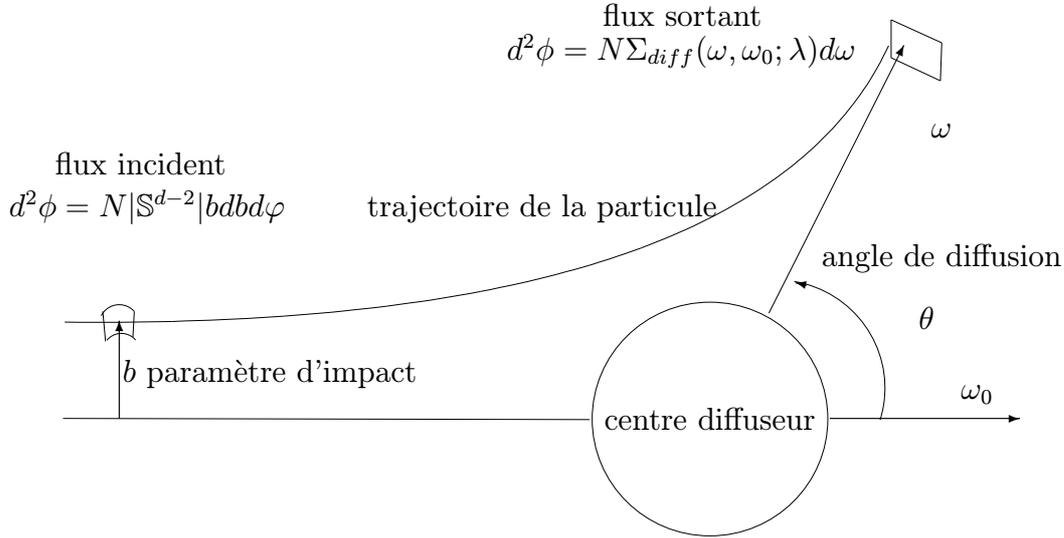


FIG. 1: Une expérience de diffusion

section efficace totale

$$\Sigma_{tot}(\omega; \lambda) = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \Sigma_{diff}(\omega, \omega'; \lambda) d\omega', \quad (3)$$

qui mesure le champ d'action du centre diffuseur. Dans les cas “physique” (particules élémentaires) la zone où la particule subit la part la plus importante de sa déviation est très petite comparée aux échelles de temps et de distance auxquelles on a affaire. La trajectoire de la particule semble donc formée de deux branches (l’une pour $t \rightarrow -\infty$ l’autre pour $t \rightarrow +\infty$) pour lesquelles le mouvement semble asymptotiquement libre. Le flux dans la direction ω est relié au flux incident par la section efficace différentielle (2).

2 La théorie de la diffusion quantique

Dans la théorie quantique l’évolution d’un système physique au cours du temps est décrite par une fonction $\Psi(t)$ à valeur dans un espace de Hilbert, \mathcal{H} , vérifiant une équation, appelée équation de Schrödinger, du type

$$\begin{cases} i\partial_t \Psi(t) = H\Psi(t) \\ \Psi(0) = f \end{cases} \quad (4)$$

où H est un opérateur auto-adjoint sur \mathcal{H} appelé Hamiltonien et f est l'état initial du système. Bien souvent on a envie de comparer la solution de (4) à celle d'un système du même type où H est remplacé par un opérateur H_0 plus "simple" que H mais proche, dans un certain sens, de H . C'est le principe de base de la théorie de la diffusion qui de ce point de vue est une théorie perturbative.

Dans le cas où f dans (4) est un vecteur propre de H associé à la valeur propre λ (i.e. $Hf = \lambda f$) la solution de (4) s'écrit $\Psi(t) = \exp(it\lambda)f$. Comme les valeurs propres de H sont déplacées même par de petites perturbations il n'est en général pas possible de comparer les solutions de (4) à celles du même système pour H_0 . C'est pourquoi en théorie de la diffusion on se restreint à la partie absolument continue de l'opérateur H qui est plus stable[†]. Rappelons que pour tout opérateur auto-adjoint H il correspond (d'après le théorème spectral) une fonction $E(\lambda)$ à valeur projecteur auto-adjoint sur l'espace \mathcal{H} telle que pour tout φ, ψ

$$(H\varphi, \psi)_{\mathcal{H}} = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)\varphi, \psi)_{\mathcal{H}}. \quad (5)$$

Un vecteur $\psi \in \mathcal{H}$ appartient au sous-espace absolument continu de H , noté \mathcal{H}^{ac} , si la mesure $m_{\psi}(\cdot) = (E(\cdot)\psi, \psi)_{\mathcal{H}}$ est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue. Une solution de (4) s'écrit alors $\Psi(t) = \exp(-itH)f$ où l'opérateur $\exp(-itH)$ est défini par la forme quadratique

$$(\exp(-itH)\varphi, \psi)_{\mathcal{H}} = \int_{\mathbb{R}} \exp(-it\lambda) d(E(\lambda)\varphi, \psi)_{\mathcal{H}}, \quad \varphi, \psi \in \mathcal{H}. \quad (6)$$

Par analogie avec le problème classique, présenté au début de cette introduction, il est intéressant de comparer les solutions $\Psi(t)$ et $\Psi_0(t)$ du système (4) pour H et H_0 , respectivement, pour de grands temps $t \rightarrow \pm\infty$. On est donc amené à se poser la question suivante :

$$\forall f \in \mathcal{H}^{ac} \quad \exists f_{\pm} \in \mathcal{H}_0^{ac} \quad \text{tel que} \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|\Psi(t) - \Psi_{0,\pm}(t)\| = 0 \quad (7)$$

avec $\Psi_{0,\pm}(t) = \exp(-itH_0)f_{\pm}$. Si (7) admet une réponse positive alors

$$f = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \exp(itH) \exp(-itH_0)f_{\pm}.$$

Ceci nous amène à décomposer le problème en deux étapes :

- d'abord le problème de l'existence des opérateurs d'onde

$$W_{\pm}(H, H_0) = s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH} e^{-itH_0}, \quad (8)$$

• ensuite celui de l'existence d'un inverse de \mathcal{H}^{ac} dans \mathcal{H}_0^{ac} pour les opérateurs d'onde, c'est le problème de la complétude asymptotique

$$\text{Ran}W_{\pm}(H, H_0) = \mathcal{H}^{ac}. \quad (9)$$

[†]Par exemple le spectre absolument continu d'un opérateur est contenu dans son spectre essentiel qui lui est stable pour toute perturbation H -compacte d'après le théorème de Weyl.

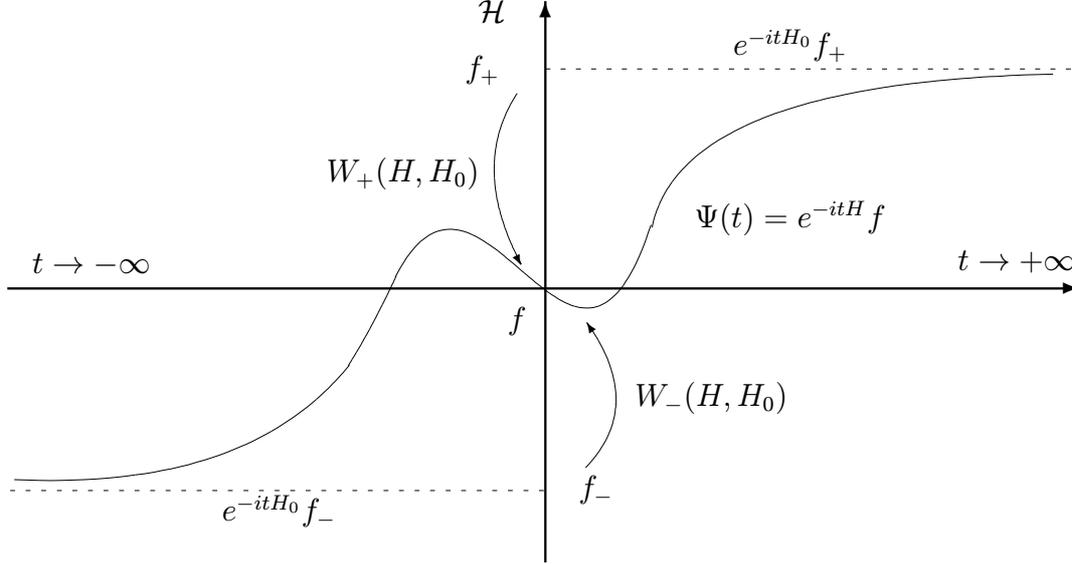


FIG. 2: Vision dynamique de la théorie de la diffusion

On peut remarquer que si les opérateurs d'onde $W_{\pm}(H, H_0)$ sont unitaires sur \mathcal{H}_0^{ac} leur complétude est équivalente à l'existence des opérateurs d'onde $W_{\pm}(H_0, H)$ unitaires sur \mathcal{H}^{ac} . Les opérateurs d'onde $W_{\pm}(H, H_0)$ réalisent alors l'équivalence unitaire entre les parties absolument continues des opérateurs H et H_0 , ce qui se traduit mathématiquement par la relation d'entrelacement

$$HW_{\pm}(H, H_0) = W_{\pm}(H, H_0)H_0. \quad (10)$$

Lorsque l'on peut répondre positivement à la première des deux questions précédentes on peut former l'opérateur de diffusion

$$\begin{aligned} \mathbf{S} = W_+^*(H, H_0)W_-(H, H_0) : \mathcal{H}^{ac} &\longrightarrow \mathcal{H}^{ac} \\ f_- &\longrightarrow f_+ \end{aligned} \quad (11)$$

qui relie directement les traces passées f_- aux traces futures f_+ sans considération en temps fini. Si les opérateurs d'onde (8) sont complets \mathbf{S} est un opérateur unitaire sur \mathcal{H}_0^{ac} et grâce à la propriété d'entrelacement (10) l'opérateur \mathbf{S} commute avec H_0 . Il est donc naturel d'étudier \mathbf{S} dans une représentation où H_0 est diagonal. Dans le cas le plus simple (où le spectre de H_0 est absolument continu et de multiplicité constante) une telle représentation de \mathcal{H} consiste en la donnée d'un espace de Hilbert \mathfrak{N} (de dimension infini) et d'un opérateur unitaire

$$F_0 : \mathcal{H}^{ac} \longrightarrow \mathbb{L}^2(\sigma_{ac}(H), \mathfrak{N})$$

vérifiant pour tout $f \in \mathcal{D}(H_0)$ $(F_0 H_0 f)(\lambda) = \lambda(F_0 f)(\lambda)$. Si on note $(F_0 f)(\lambda) = \Gamma_0(\lambda)f \in \mathfrak{N}$ alors l'action de \mathbf{S} se ramène, dans cette représentation, à la multiplication par la

fonction à valeur opérateur

$$S(\lambda) = \Gamma_0(\lambda)S\Gamma_0^*(\lambda) \quad (12)$$

appelée matrice de diffusion. Ce dernier objet contient toute l'information sur le processus de diffusion associé à l'opérateur H .

Dans le cas de la diffusion de particules quantiques $S(\lambda)$ est un opérateur intégral sur la sphère \mathbb{S}^{d-1} . Le carré du module de son noyau $s(\omega, \omega_0; \lambda)$, $\omega, \omega_0 \in \mathbb{S}^{d-1}$, s'interprète physiquement comme la section différentielle efficace de l'interaction

$$\Sigma_{diff}(\omega, \omega_0; \lambda) = \frac{\lambda^{-(d-1)/2}}{(2\pi)^{d-1}} |s(\omega, \omega_0; \lambda)|^2, \quad \omega \neq \omega_0. \quad (13)$$

Cette nouvelle définition de la section différentielle efficace entraîne l'apparition de propriétés différentes par rapport à la définition (2) en particulier pour la singularité sur la diagonale $\omega = \omega_0$ de la fonction $\Sigma_{diff}(\omega, \omega_0; \lambda)$ (voir par exemple [LL64] chapitre IV section 20 et [LL66] chapitre XVII section 127).

3 L'opérateur de Schrödinger, approche dépendante du temps

L'évolution d'une particule élémentaire dans un champ électromagnétique (E, B) est décrite en mécanique quantique par l'équation de Schrödinger (4) où le Hamiltonien est l'opérateur aux dérivées partielles suivant

$$H = (D - A)^2 + V. \quad (14)$$

La fonction réelle à valeurs scalaires V est appelé le potentiel électrique et la fonction réelle à valeurs vectorielles $A = (A_1, \dots, A_d)$ est appelée le potentiel magnétique. Ces potentiels sont reliés au champ (E, B) par les équations

$$B = \text{rot}A, \quad E = -\nabla V - \partial_t A. \quad (15)$$

Si les potentiels V et A définissent complètement le champ (E, B) , il découle des équations précédentes que le champ (E, B) ne définit pas de manière unique les potentiels. En effet si on se donne une fonction f , régulière, et qu'on définit de nouveaux potentiels (V', A') par

$$V' = V - \partial_t f, \quad A' = A + \nabla f, \quad (16)$$

alors le couple (V', A') définit le même champ (E, B) que les potentiels (V, A) . On peut donc imposer aux potentiels une condition supplémentaire (par rapport aux équations

(15)), qu'on appelle condition de jauge. Les opérateurs de Schrödinger H et H' associés aux potentiels (V, A) et (V', A') , liés par (16), ne sont pas égaux mais seulement unitairement équivalents

$$H' = e^{if} H e^{-if}. \quad (17)$$

Il existe beaucoup de jauges, certaines étant plus pratiques que d'autres selon la situation. Pour des potentiels indépendants du temps il est souvent commode d'utiliser la jauge de Coulomb définie par

$$\operatorname{div} A = 0. \quad (18)$$

Sous cette condition les potentiels s'expriment directement en fonction du champ par les équations

$$-\Delta V + \operatorname{div} E = 0, \quad -\Delta A - \operatorname{rot} B = 0.$$

Une autre jauge particulièrement importante en théorie de la diffusion est la jauge transverse ou jauge de Poincaré définie par la condition

$$\langle A(x), x \rangle = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^d. \quad (19)$$

Ce choix de jauge fut introduit par Uhlenbeck [Uhl82]. Modulo une hypothèse de régularité cette jauge peut être construite à partir d'un potentiel magnétique A' quelconque par la formule

$$A_j(x) = \sum_{k=1}^d \int_0^1 F_{kj}(sx) x_k ds, \quad F_{kj}(x) = \partial_{x_k} A'_j(x) - \partial_{x_j} A'_k(x). \quad (20)$$

La multiplicité des jauges envisageables pour décrire une situation ad hoc donne aux potentiels un caractère artificiel dans la théorie classique, par opposition à la "réalité" du champ (E, B) .

Pour des potentiels $(V(x), A(x))$ ne dépendant pas du temps on fait en général une hypothèse de décroissance (lente) aux grandes distances

$$|\partial_x^\alpha A(x)| = O((1 + |x|)^{-\rho - |\alpha|}), \quad |\partial_x^\alpha V(x)| = O((1 + |x|)^{-\rho' - |\alpha|}), \quad \rho, \rho' > 0, \quad (21)$$

pour $|\alpha| \leq 2$. Sous ce type d'hypothèses le spectre absolument continu coïncide avec le demi-axe réel positif, i.e. avec les énergies positives pour lesquelles la particule n'est pas classiquement capturée par le champ. Au contraire le spectre négatif est composé de valeurs propres qui correspondent à des états liés du système. En théorie de la diffusion le choix le plus naturel pour le Hamiltonien de référence H_0 est celui correspondant à un champ électromagnétique nul $(V(x), A(x)) = (0, 0)$, soit

$$H_0 = -\Delta, \quad \mathcal{D}(H_0) = \mathbf{H}^2(\mathbb{R}^d), \quad \mathcal{H}_0^{ac} = \mathcal{H} = \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^d). \quad (22)$$

3 L'OPÉRATEUR DE SCHRÖDINGER, APPROCHE DÉPENDANTE DU TEMPS 7

Pour des potentiels à courte portée, c'est à dire lorsque $\rho, \rho' > 1$ dans (21), l'existence des opérateurs d'onde (8) remonte à [Coo57]. La méthode de Cook repose sur la vérification du critère suivant

$$\int_{\mathbb{R}} \|(H - H_0)e^{-itH_0} f\| dt < \infty \quad (23)$$

sur un ensemble de vecteur f dense dans $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}^d)$ (par exemple via la méthode de la phase stationnaire). Lorsque la partie électrique du potentiel vérifie (21) avec un $\rho' > 1$ et que la partie magnétique du potentiel vérifie (21) avec un $\rho > 1/2$ et l'hypothèse supplémentaire de jauge transverse (19) les opérateurs d'onde usuels (8) existent encore [LT87]. Ce résultat exceptionnel peut être obtenu par le critère de Cook en remarquant que pour

$$f \in \{f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) : \text{supp } \hat{f} \subset \{\xi : 0 < \lambda_0 \leq |\xi|^2 \leq \lambda_1 < \infty\}\}$$

on a

$$\|(H - H_0)e^{-itH_0} f\| = O((1 + |t|)^{-1-\varepsilon}), \quad \varepsilon > 0,$$

puisque dans l'intégrale

$$\int_{\mathbb{R}^d} e^{i\langle x, \xi \rangle - t|\xi|^2} (2i \langle A(x), \xi \rangle + i \text{div} A(x) + |A(x)|^2 + V(x)) \hat{f}(\xi) \frac{d\xi}{(2\pi)^{d/2}}$$

le seul terme à longue portée $\langle A(x), \xi \rangle$ s'annule au point stationnaire $\xi = x/(2t)$ sous l'hypothèse (19).

Pour des potentiels généraux à longue portée, c'est à dire vérifiant (21) avec $\rho, \rho' \in (0, 1]$ et sans hypothèse supplémentaire, les opérateurs d'onde (8) n'existent plus en général. C'est en particulier le cas pour le potentiel de Coulomb $V(x) = c/|x|$ qui joue un rôle très important en physique. On doit donc introduire la notion d'opérateurs d'onde modifiés : dans (8) l'évolution libre $\exp(-itH_0)$ doit être remplacé par un autre groupe unitaire $U_0(t)$ proche, dans un certain sens, de $\exp(-itH_0)$ et qu'on appelle l'évolution modifiée. La première construction d'opérateurs d'onde modifiés remonte à [Dol64] dans le cas du potentiel de Coulomb. Il existe plusieurs manières de construire l'évolution modifiée $U_0(t)$. Cette modification peut être faite d'une manière dépendante du temps en construisant une évolution $U_0(t) = \exp(iS(t, D))$, en représentation de moment, où $S(t, \xi)$ est une solution d'une équation d'Hamilton-Jacobi qui est proche de $t\xi^2$ [BM70, Hör76], ou aussi en cherchant $U_0(t)$ sous la forme

$$U_0(t) = (2|t|)^{-d/2} \exp(i(\Omega(t, x) + |x|^2/4t)) \hat{f}(x/2t),$$

donc en représentation d'espace, où Ω est une solution "petite", dans un certain sens, d'une équation non-linéaire [Yaf80]. Dans ces différentes constructions l'existence des opérateurs d'onde modifiés repose sur la méthode de Cook. Le problème de la complétude asymptotique est par contre beaucoup plus délicat. L'approche la plus générale pour résoudre ce problème repose sur la méthode de Enss [Ens89] qui consiste à relier asymptotiquement les observables D et x/t (voir [DG97] pour une description complète de l'approche dépendant du temps). Le défaut de ces approches est qu'elles sont inadaptées à l'obtention d'une formule de représentation pour la matrice de diffusion, c'est pourquoi on suit dans cette thèse une approche totalement différente.

4 L'approche stationnaire

Quand les potentiels V et A ne dépendent pas du temps il est naturel de chercher à définir l'évolution modifiée de manière stationnaire $U_0(t) = J \exp(-itH_0)$ où l'opérateur J (appelé identificateur ou modificateur) ne dépend pas du temps. Cette approche fut d'abord proposée par Isozaki et Kitada dans [IK85a]. L'apport majeur de Isozaki et Kitada fut de considérer des opérateurs d'onde modifiés de la forme

$$W_{\pm}(H, H_0, J) = s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH} J e^{-itH_0}, \quad (24)$$

avec un choix de modificateurs $J = J_j$, $j = 1, 2$ différents selon que $t \rightarrow -\infty$ ou que $t \rightarrow +\infty$. Dans [IK85a], où seul le cas électrostatique ($A = 0$ dans (14)) est considéré, les identifications J_j étaient construites sous la forme d'opérateurs intégraux de Fourier, leur existence et leur complétude reposant sur la méthode de Enss (cette approche fut étendue au cas d'un champ électromagnétique par Nicoleau et Robert [Nic91, NR91]). La phase φ des modificateurs J_j doit vérifier l'équation eiconale

$$|\nabla\varphi|^2 - 2 \langle A, \nabla\varphi \rangle + V(x) + |A(x)|^2 = |\xi|^2, \quad \nabla = \nabla_x, \quad (25)$$

et des estimations de décroissance dans des zones entrantes et sortantes de l'espace des phases $\pm \langle \hat{x}, \hat{\xi} \rangle > \kappa$, $\kappa \in (0, 1)$

$$\partial_x^\alpha (\varphi(x, \xi) - \langle x, \xi \rangle) = O(|x|^{1-\rho-|\alpha|}). \quad (26)$$

L'amplitude des modificateurs étant quant à elle supportée dans les zones entrantes et sortantes $\pm \langle \hat{x}, \hat{\xi} \rangle > \kappa$.

Cette approche a l'avantage de fournir une formule de représentation stationnaire (i.e. en terme de la résolvante $R(z) = (H - z)^{-1}$ de l'opérateur H) pour la matrice de diffusion. Cette formule a été établie pour le cas électrique dans [IK86] et pour le cas magnétique dans [Nic91, Nic94]. Formellement celle-ci peut s'écrire

$$S(\lambda) = Id - 2i\pi\Gamma_0(\lambda) (J_1^* T_2 - T_1^* R(\lambda + i0) T_2) \Gamma_0^*(\lambda), \quad (27)$$

où $T_j = HJ_j - H_0J_j$, $j = 1, 2$ et

$$(\Gamma_0(\lambda)f)(\omega) = 2^{-1/2} k^{(d-2)/2} \hat{f}(k\omega), \quad k = \lambda^{1/2} > 0, \quad \omega \in \mathbb{S}^{d-1}, \quad (28)$$

est à un facteur numérique près la restriction de la transformée de Fourier de f à la sphère de rayon k . Pour justifier cette formule on a besoin de deux choses : d'une part on a besoin d'estimations de propagation pour définir le terme contenant la résolvante $\Gamma_0(\lambda)T_1^*R(\lambda + i0)T_2\Gamma_0^*(\lambda)$ et d'autre part on a besoin de pouvoir définir la restriction à la sphère \mathbb{S}_k^{d-1} de rayon k de l'opérateur $J_1^*T_2$. Dans le cas d'une perturbation électrique à courte portée cette formule se ramène à la formule de Born

$$S(\lambda) = Id - 2i\pi\Gamma_0(\lambda) (V - VR(\lambda + i0)V) \Gamma_0^*(\lambda), \quad (29)$$

dont la formule (27) est en quelque sorte une généralisation.

Cette approche fut reprise par Yafaev dans [Yaf98] avec quelques différences :

- les solutions exactes de l'équation eiconale (25) furent remplacées par des solutions "approchées" (à des termes courte portée près) mais explicites (cf. section 2.1.1),
- la démonstration de l'existence et de la complétude des opérateurs d'onde reposait sur la théorie des perturbations lisses (cf. section 1.1.1) et non sur la méthode de Enss.

C'est cette approche que l'on va reprendre dans cette thèse.

L'existence des opérateurs d'onde (24) dans la théorie des perturbations lisses repose sur un critère du type (23) : on doit montrer que la perturbation effective

$$T = HJ - JH_0 \quad (30)$$

admet une décomposition du type

$$T = K^*BK_0 \quad (31)$$

où B est un opérateur borné et K, K_0 sont, respectivement, localement H et H_0 -lisses, c'est à dire vérifient

$$\sup_{\substack{f \in E(\Lambda)\mathcal{H} \\ \|f\|=1}} \int_{\mathbb{R}} \|Ke^{-itH}f\|^2 dt < \infty \quad (32)$$

pour tout intervalle borné $\Lambda \subset \sigma_{ac}(H)$. L'isométrie et la complétude de ces opérateurs d'onde nécessitent que l'identification J soit "suffisamment" proche d'un opérateur unitaire, plus précisément il faut que

$$s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} (J^*J - Id)e^{-itH_0}E_0(\Lambda) = 0, \quad s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} (JJ^* - Id)e^{-itH}E(\Lambda) = 0. \quad (33)$$

Du fait des rôles symétriques joués par les opérateurs H_0 et H cette théorie n'est pas intrinsèquement une théorie perturbative.

Les estimations de type (32) se ramènent à des estimations sur les valeurs de la résolvante $R(z) = (H - z)^{-1}$, dans une topologie convenable, lorsque z s'approche du spectre absolument continu. La plus classique de ces estimations est le *principe d'absorption limite*

$$\sup_{\substack{\text{Re } z \in \Lambda \\ 1 \geq |\text{Im } z| > 0}} \|\langle x \rangle^{-p} R(z) \langle x \rangle^{-p}\| < \infty, \quad p > 1/2, \quad \Lambda \subset (0, \infty). \quad (34)$$

où Λ est un intervalle compact. En particulier elle implique que l'opérateur $\langle x \rangle^{-p}$, $p > 1/2$, est localement H -lisse. D'un point de vue physique le principe d'absorption limite admet une interprétation simple. Comme

$$\|\langle x \rangle^{-p} e^{-itH}f\|^2 = (\langle x \rangle^{-2p} e^{-itH}f, e^{-itH}f)_{\mathcal{H}},$$

cette quantité correspond à la moyenne de l'observable quantique $\langle x \rangle^{-2p}$. Dans l'approximation semi-classique cette quantité doit donc être proche de la valeur de $\langle x(t) \rangle^{-2p}$ le long de la trajectoire classique correspondante, asymptotiquement libre. Comme le long de cette trajectoire on doit avoir $|x(t)| \sim |t|$ on peut donc espérer que

$$\| \langle x \rangle^{-p} e^{-itH} f \|^2 \sim \langle t \rangle^{-2p}$$

qui est intégrable si et seulement si $p > 1/2$. Le principe d'absorption limite suffit à traiter le cas des perturbations à courtes portées. Par exemple dans le cas électrique si $V(x) = O(\langle x \rangle^{-\rho})$, $\rho > 1$ en prenant $J = Id$ on factorise facilement la perturbation en produit de perturbations H et H_0 -lisses :

$$T = H - H_0 = V(x) = \langle x \rangle^{-\rho/2} \left(\langle x \rangle^{\rho/2} V(x) \langle x \rangle^{\rho/2} \right) \langle x \rangle^{-\rho/2},$$

et on peut alors justifier la formule de représentation stationnaire (29) pour $S(\lambda)$.

Dans le cas des potentiels à longue portée le principe d'absorption limite ne suffit plus. Pour le potentiel de Coulomb[†] $V(x) = c/|x|$ il suffirait que le principe d'absorption limite soit vrai pour $p = 1/2$. Hélas ceci n'est pas possible car l'estimation (34) est déjà violée dans le cas de l'opérateur libre H_0 si $p = 1/2$. C'est pourquoi on a besoin de *l'estimation de radiation*. Cette estimation affirme que l'opérateur

$$G = \langle x \rangle^{-1/2} \nabla^\perp = \langle x \rangle^{-1/2} (\nabla - \hat{x}(\hat{x} \cdot \nabla)), \quad (35)$$

est localement H -lisse. Là encore l'interprétation physique est très instructive. Le long d'une trajectoire classique la vitesse tend à s'aligner, aux grandes distances, avec la direction du vecteur position. En particulier la partie orthoradiale de cette vitesse doit décroître avec le temps. Ce gain de décroissance doit rendre l'observable quantique G intégrable en temps

$$\| \langle x \rangle^{-1/2} \nabla^\perp e^{-itH} f \|^2 \sim \langle t \rangle^{-1-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0.$$

Pour des opérateurs différentiels à coefficients vérifiant (21) l'estimation de radiation s'obtient grâce au principe d'absorption limite (cf. théorème 1.3.13).

Il existe de nombreuses méthodes pour démontrer le principe d'absorption limite, mais la plus simple est certainement la méthode des commutateurs de Mourre (cf. section 1.1.3). Sous l'hypothèse principale qu'il existe un opérateur auto-adjoint \mathcal{A} tel que le commutateur $i[H, \mathcal{A}]$ soit essentiellement positif cette méthode fournit des estimations pour la résolvante de H , "sandwichée" par des fonctions de l'opérateur \mathcal{A} , desquelles on peut déduire le principe d'absorption limite [PSS81]. Pour l'opérateur de Schrödinger cette approche fonctionne en choisissant comme opérateur conjugué \mathcal{A} le générateur des dilatations $(x \cdot D + D \cdot x)/2$. Une fois de plus pour comprendre ce choix l'interprétation physique de cette méthode est riche d'enseignement. En mécanique classique l'obtention de l'estimation $d^2|x(t)|^2/dt^2 \geq c > 0$ le long d'une trajectoire assure que cette trajectoire

[†]En fait pour n'importe quel potentiel à longue portée.

est asymptotiquement libre (i.e. $|x(t)| \sim |t|$ dont on a déjà vu le lien avec le principe d'absorption limite). L'observable quantique qui correspond à $d^2|x(t)|^2/dt^2$ étant le double commutateur $i[H, i[H, |x|^2]]$ celui-ci doit donc être essentiellement positif. Ceci conduit directement au choix $\mathcal{A} = i[H, |x|^2]$. Dans le cas électrique $i[H, |x|^2] = 2(x.D + D.x)$, on comprend alors facilement le rôle très important joué par le générateur des dilatations $(x.D + D.x)/2$ dans la théorie de la diffusion pour l'opérateur de Schrödinger[†].

5 Les résultats principaux

Dans cette thèse on considère l'opérateur de Schrödinger (14) avec un potentiel électromagnétique $(V, A) = (V_L, A_L) + (V_S, A_S)$ dont la partie longue portée (V_L, A_L) vérifie (21) pour tout α et la partie courte portée (V_S, A_S) vérifie (21) pour $|\alpha| = 0$ avec un $\rho = \rho' = \rho_0 > 1$. Contrairement à d'autres travaux on ne fait pas ici d'hypothèse de jauge sur le potentiel magnétique A^\ddagger . Ceci permettra de retrouver les résultats de [LT87, Nic91, NR91] comme des cas particuliers.

L'addition de termes à courte portée pose quelques problèmes pour obtenir le principe d'absorption limite. En effet la théorie de Mourre ne conduit directement à l'estimation (34) que si la partie courte portée (V_S, A_S) vérifie (21) pour $|\alpha| = 0$ et un $\rho = \rho' = \rho_0 \geq 2$ [PSS81]. Cependant une petite modification de cette méthode, proposée dans [Yaf85] dans le cas électrique $A = 0$, permet d'obtenir le principe d'absorption limite sous l'hypothèse $\rho_0 > 1$. Ce résultat technique est démontré dans le cas magnétique dans l'Appendice A.

Via le théorème de multiplication des matrices de diffusion le principe d'absorption limite nous permet d'éliminer les termes à courte portée et de se concentrer sur l'étude des termes à longue portée. Pour l'opérateur

$$H_1 = (D - A_L)^2 + V_L,$$

l'ensemble des estimations de résolvante dont on a besoin est obtenu par la méthode de Mourre (cf. sections 1.3.2 et 1.3.3), comme dans le cas électrique $A = 0$, avec le choix $\mathcal{A} = (x.D + D.x)/2$. Cependant pour les estimations de propagation microlocales on les redémontre pour une classe plus large d'opérateurs pseudo-différentiels par rapport à [IK84, IK85b, Jen85].

Dès que ce travail préliminaire est terminé on peut démarrer la théorie de la diffusion pour le couple H_0, H . Il est naturel de construire les identifications J_\pm sous forme d'opérateurs pseudodifférentiels (opd). En effet ce formalisme permet facilement de traiter les combinaisons des opérateurs J_\pm et T_\pm avec les opérateurs $\langle x \rangle^{-p}$, G , H_1 , H_0 , qui sont eux

[†]Dans le cas électromagnétique on peut encore faire le choix $\mathcal{A} = (x.D + D.x)/2$ même s'il n'est pas le plus naturel.

[‡]Mis à part la condition $\operatorname{div} A \in \mathbb{L}^\infty(\mathbb{R}^d)$ qui sert à assurer que le domaine de H est bien $\mathbf{H}^2(\mathbb{R}^d)$ cf. section 1.3.1.

mêmes des opd, ou de manipuler les adjoints J^* (cf. section 1.2). En plus cette théorie nous fournit des critères simples de continuité et de compacité très utiles. Cependant pour traiter le cas général $\rho > 0$ dans (21) on doit manipuler des opd du type $\mathcal{S}_{\varrho,\delta}^m$ avec $\varrho = \rho$ et $\delta = 1 - \rho$. Lorsque $\rho \leq 1/2$ on ne peut plus utiliser la théorie générale de Hörmander pour ces classes d'opd. C'est pourquoi on est obligé d'utiliser les classes de symboles oscillants $\mathcal{C}^m(\Phi)$, $\Phi \in \mathcal{S}^r$, $r \in [0, 1)$, introduites par Yafaev dans [Yaf00a], qui tiennent compte de la structure particulière du symbole des opd que l'on manipule (cf. section 1.2.2). On rencontre aussi d'autres difficultés lors de la restriction de certains opd à la sphère (voir section 1.2.3).

Pour développer la théorie des perturbations lisses pour le couple H_0, H_1 on cherche le symbole des modificateurs sous la forme $j_{\pm}(x, \xi) = \exp(i\Phi_{\pm}(x, \xi))$ de telle sorte que $\Psi_{\pm}(x, \xi) = \exp(i\langle x, \xi \rangle)j_{\pm}(x, \xi)$ soit une solution approchée, à des termes courte portée près, de l'équation de Schrödinger stationnaire $H\Psi_{\pm} = |\xi|^2\Psi_{\pm}$ pour que la perturbation effective $T_{\pm} = HJ_{\pm} - J_{\pm}H_0$ soit un opd d'une classe $\mathcal{C}^{-1-\varepsilon}(\Phi_{\pm})$, $\varepsilon > 0$. Si cela était possible on obtiendrait, grâce au principe d'absorption limite, la décomposition (31) avec $K = K_0 = \langle x \rangle^{-1/2-\varepsilon/2}$, la forme du symbole de J_{\pm} assurant que les conditions (33) soient vérifiées. En injectant l'Ansatz précédent pour Ψ_{\pm} dans l'équation de Schrödinger on obtient que la phase $\varphi_{\pm}(x, \xi) = \langle x, \xi \rangle + \Phi_{\pm}(x, \xi)$ doit vérifier l'équation eiconale (25), à des termes courte portée près, et les estimations (26) pour tout α . Dans la section 2.1.1 on arrive à construire de telles solutions φ_{\pm} par approximations successives mais celles-ci ne satisfont (26) qu'en dehors d'un voisinage conique (arbitrairement petit) de la direction $\mp\hat{\xi}$. C'est pourquoi on doit ajouter dans le symbole de J_{\pm} des fonctions de troncatures $\zeta_{\pm}(x, \xi)$, asymptotiquement homogènes de degré 0, pour éliminer ces "mauvaises" directions. On ajoute aussi une fonction de troncature $\psi(|\xi|^2)$ qui permet de localiser notre étude sur un intervalle d'énergie $\Lambda \subset (0, \infty)$ borné et disjoint de zéro. Les termes supplémentaires qui apparaissent dans le symbole de la perturbation T_{\pm} ne décroissent que comme $|x|^{-1}$ quand $|x| \rightarrow \infty$. Grâce au calcul pseudo-différentiel et à l'estimation de radiation on obtient quand même une décomposition du type (31)

$$T_{\pm} = \langle x \rangle^{-p} B_{\pm}^{(r)} \langle x \rangle^{-p} + G^* B_{\pm}^{(s)} G, \quad (36)$$

avec $B_{\pm}^{(r)}$ et $B_{\pm}^{(s)}$ bornés. Cette décomposition assure l'existence des opérateurs d'onde $W_{\pm}(H_1, H_0, J_{\sigma})$, $W_{\pm}(H_0, H_1, J_{\sigma})$ avec $\sigma = "+"$ ou $\sigma = "-"$. Par un argument de phase non-stationnaire on obtient alors facilement la première estimation de (33) et donc l'isométrie des opérateurs d'onde $W_{\pm}(H_1, H_0, J_{\pm})$. La complétude résulte alors de ce que $(J_{\pm}J_{\pm}^* + J_{\mp}J_{\mp}^* - Id)E_1(\Lambda)$ est un opérateur compact (pour un choix judicieux des fonctions ζ_{\pm}) et de l'équation

$$s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} J_{\mp}J_{\mp}^* e^{-itH_1} E_1(\Lambda) = 0.$$

Par des arguments de phase stationnaire, cette fois, on montre que cette construction coïncide avec les traditionnelles constructions dépendantes du temps, ce qui nous permet de retrouver certains résultats déjà connus et entre autres on récupère que les opérateurs d'onde $W_{\pm}(H, H_0, J_{\pm})$ ne dépendent pas du choix de ζ_{\pm} .

On obtient alors la formule de représentation stationnaire suivante pour la matrice de la diffusion $S(\lambda) = S(\lambda; H_1, H_0)$ (qui ne diffère de la matrice de diffusion $S(\lambda; H, H_0)$ que par des termes compacts)

$$S(\lambda) = -2i\pi\Gamma_0(\lambda) (J_+^*T_- - T_+^*R(\lambda + i0)T_-) \Gamma_0^*(\lambda). \quad (37)$$

A partir des estimations de propagation microlocales et en utilisant l'équation de transport dans la construction des modificateurs on peut montrer que le noyau du terme de $S(\lambda)$ contenant la résolvante de H est une fonction régulière $C^k(\mathbb{S}^{d-1} \times \mathbb{S}^{d-1} \times \mathbb{R}_+)$ avec k arbitraire. Ce terme peut donc être considéré comme un "reste" dans la formule (37) c'est en particulier un opérateur compact sur $\mathbb{L}^2(\mathbb{S}^{d-1})$. On a donc juste besoin de se concentrer sur le terme $S_0(\lambda) = \Gamma_0(\lambda) (J_+^*T_-) \Gamma_0^*(\lambda)$ qui est la restriction d'un opd à la sphère de rayon $k = \lambda^{1/2}$. L'existence de cette restriction peut être justifiée par une décomposition de type (36) pour l'opérateur $J_+^*T_-$ mais la représentation de cette restriction en tant qu'opd pose certaines difficultés (cf. section 1.2.3). Les singularités du noyau de cet opérateur étant contenues dans la diagonale $\omega = \omega'$, pour l'étude des propriétés spectrales de $S(\lambda)$ il nous suffit d'étudier l'opérateur $\chi_0 S_0(\lambda) \chi_0$ où χ_0 est une fonction de troncature $C^\infty(\mathbb{S}^{d-1})$ supporté au voisinage d'un point ω_0 , ceci pour chaque $\omega_0 \in \mathbb{S}^{d-1}$. Cette remarque nous permet de travailler avec une représentation de l'opd $\chi_0 S_0(\lambda) \chi_0$ dans une carte locale spéciale du voisinage de ω_0 sur la sphère (cf. Figure 1.1). Dans cette carte locale on arrive à montrer qu'à des termes compacts près $\chi_0 S_0(\lambda) \chi_0$ est un opd d'amplitude

$$\exp(i\Theta(y/k, k\omega, k\omega')) \chi_0(\omega) \chi_0(\omega'), \quad \omega, \omega' \in \mathbb{S}^{d-1}, \quad (38)$$

où y appartient à Λ_{ω_0} l'hyperplan de \mathbb{R}^d orthogonal à ω_0 . La fonction Θ s'exprime directement à partir des solutions $\varphi_\pm(x, \xi) = \langle x, \xi \rangle + \Phi_\pm(x, \xi)$ de l'équation eiconale (25) par

$$\Theta(x, \xi, \xi') = \Phi_-(x, \xi') - \Phi_+(x, \xi).$$

L'asymptotique de Θ quand $|y| \rightarrow \infty$ ne dépend donc que du comportement des potentiels A_L et V_L à l'infini.

Lorsque A_L et V_L sont des fonctions asymptotiquement homogènes de degré $-\rho \in (0, 1)$ la fonction $\Theta(y/k, k\omega, k\omega')$ est elle aussi asymptotiquement homogène en y mais de degré $1 - \rho$. Le fait que $\Theta(y/k, k\omega, k\omega') \rightarrow \infty$ quand $|y| \rightarrow \infty$ permet de montrer que le spectre de $S(\lambda)$ recouvre le cercle unité dans ce cas. Ce résultat est en particulier valable dans le cas où $V_L = 0$ et A_L est asymptotiquement homogène de degré $-\rho$, $\rho \in (1/2, 1)$ et vérifie l'hypothèse de jauge transverse. Dans cette situation les opérateurs d'onde usuels (8) existent, la matrice de diffusion $S(\lambda)$ est définie en terme de ces opérateurs d'onde usuels et pourtant son spectre recouvre bien le cercle unité! Ce résultat contredit un résultat de Nicoleau [Nic94] qui affirme que dans ce cas $S(\lambda) - Id$ est un opérateur compact. Ce type de résultats est radicalement différent de ce qu'on obtient pour des potentiels à courte portée où la matrice de diffusion est une perturbation compacte de l'identité et son spectre est composé de valeurs propres ne pouvant s'accumuler qu'au point 1. Dans cette situation le symbole principal de $S(\lambda)$ vaut 1 ce qui correspond, en terme de singularité diagonale, à la présence de la fonction de Dirac dans le noyau de $S(\lambda)$. Ces résultats soulignent les différences qualitatives entre les natures des singularités diagonales dans les cas longue et courte portées.

6 L'effet Aharonov-Bohm

Le fait que l'opérateur de Schrödinger s'exprime en fonction des potentiels V et A et non du champ (E, B) a conduit Y. Aharonov et D. Bohm à concevoir une expérience aux conséquences troublantes[†] [AB59]. Un solénoïde cylindrique “infiniment” long parcouru par un courant génère un champ magnétique contenu à l'intérieur du solénoïde. Le potentiel magnétique associé à ce champ ne peut pas être à support compact puisque d'après la formule de Stokes on a

$$\phi = \oint_{|x|=R} A(x) \vec{dl} = \int \int_{|x|\leq R} B(x) dz = C^{ste}. \quad (39)$$

En fait en jauge transverse le potentiel s'écrit à l'extérieur du solénoïde de la manière suivante

$$A(x) = \frac{\phi}{2\pi} (-x_2, x_1)/|x|^2, \quad x \in \mathbb{R}^2, \quad |x| \geq R > 0, \quad \phi \in \mathbb{R}, \quad (40)$$

où ϕ est le flux du champ magnétique B au travers de la section du solénoïde. En particulier ce potentiel ne décroît à l'infini que comme $|x|^{-1}$ et rentre donc dans le cadre des potentiels à longue portée. Aharonov et Bohm considérèrent deux faisceaux d'électrons contournant un solénoïde par deux chemins différents et prédirent l'apparition d'interférences[‡] entre les deux faisceaux ainsi obtenus. Le déphasage entre les deux faisceaux est en fait la circulation du potentiel magnétique A le long du contour encerclant le solénoïde qui d'après (39) est égal au flux du champ B : $\delta_{AB} = \phi$. Il y a donc des interférences entre

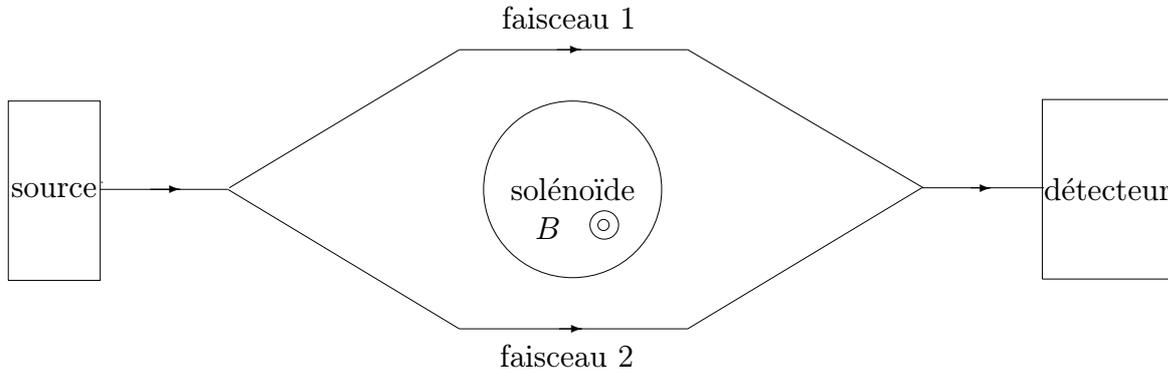


FIG. 3: L'expérience d'Aharonov et Bohm

les deux faisceaux si δ_{AB} n'est pas un multiple de 2π . Pour bien comprendre l'importance

[†]En fait il existe une controverse sur la paternité de cette découverte, celle-ci reviendrait plutôt à W. Ehrenberg et R. W. Siday [ES49].

[‡]Dont la mise en évidence expérimentale fut faite par Chambers [Cha60].

de cette expérience il faut se rappeler qu'en mécanique classique les équations du mouvement de la particule peuvent s'exprimer en fonction du seul champ électromagnétique (E, B) . Du point de vue de la mécanique classique on est donc confronté à un paradoxe : du fait de leur trajectoire les électrons ne sont jamais entré en interaction avec le champ magnétique B et pourtant ils ont subi son action ! C'est la source de toute la polémique autour de l'effet Aharonov-Bohm [AB61, AB63].

Cet exemple a été repris par de très nombreux auteurs depuis plus de quarante ans (cf. [Rui83]). L'approche la plus souvent utilisée pour le potentiel (40) repose essentiellement sur la construction explicite (en terme de fonctions de Bessel) de fonctions propres généralisées du spectre positif de l'opérateur $(D - A)^2$. Cette approche permet de montrer que dans ce cas le spectre de $S(\lambda)$ consiste en deux valeurs propres de multiplicités infinies $\exp(\pm i\phi/2)$. On peut alors calculer exactement la section efficace différentielle

$$\Sigma_{diff}(\omega, \omega_0; \lambda) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\lambda}} \frac{\sin^2(\phi/2)}{\sin^2(\theta/2)}, \quad 2 \sin(\theta/2) = |\omega - \omega_0|, \quad (41)$$

et vérifier que la section efficace totale (3) s'annule lorsque le flux est un multiple de 2π . Cette construction est rendue possible pour deux raisons :

- d'une part la forme radiale du potentiel (40) permet une séparation des variables dans l'équation de Schrödinger stationnaire,
- d'autre part les auteurs imposent en plus une condition aux limites en $|x| = R$ (avec parfois $R = 0$) qui conduit aux résultats.

De récents travaux [AT98, DŠ98] ont montré qu'il était possible de choisir des conditions aux limites différentes (non-invariante par rotation) de celles utilisées jusqu'ici conduisant à des résultats différents sans pour autant que ces conditions aux limites admettent une interprétation physique évidente. Du point de vue de la théorie de la diffusion cette approche n'est pas satisfaisante. En effet on s'attend à ce que les propriétés principales de la matrice de diffusion soient déterminées par l'asymptotique aux grandes distances des potentiels et non pas par une condition à l'origine.

Dès que le champ magnétique $F_{j,k}(x)$ est à support compact il découle de (20) que, en jauge transverse, le potentiel A est une fonction asymptotiquement homogène de degré -1 . Cette décroissance du potentiel vecteur A en $1/|x|$ est cruciale en théorie de la diffusion puisqu'elle fait de A un potentiel à longue portée alors que, du point de vue de la mécanique classique, la situation semble être à courte portée. Dans la section 2.3.2 on étudie en détail deux familles de tels potentiels. Il s'agit d'exemples physiques de champs magnétiques à support compact générés par des solénoïdes parcourus par un courant I (cf. Figure 4) :

le solénoïde infini (d=2) c'est un cylindre (dont la section n'est pas forcément un disque) de direction l'axe des z . Dans ce cas le champ magnétique B est de direction constante, l'axe des z , et nul à l'extérieur du solénoïde. Dans cette dernière zone le potentiel vecteur A s'exprime, en coordonnées cylindriques, par

$$A(x) = f(\vartheta)(-x_2, x_1)/|x|^2, \quad |x| \geq R > 0, \quad (42)$$

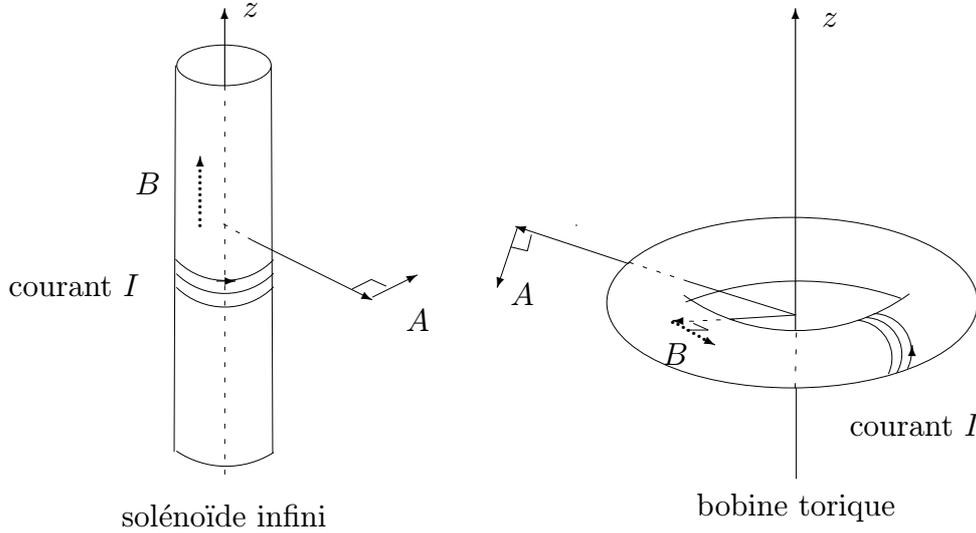


FIG. 4: Exemples de champs magnétiques à support compact

où f est une fonction 2π -périodique et C^∞ . On peut noter que

$$\phi = \int_0^{2\pi} f(\theta) d\theta$$

est le flux du champ magnétique au travers de la section du solénoïde.

la bobine torique (d=3) c'est un tore de révolution autour de l'axe des z . Le champ magnétique est perpendiculaire à la section du tore (qui n'est pas forcément un disque) et nul en dehors du tore. A grande distance le potentiel vecteur s'exprime en coordonnées sphériques[†] par

$$A(x) = \frac{f(\varphi)}{|x|} \vec{e}_\varphi, \quad (43)$$

où f est une fonction positive et C^∞ (et φ est la colatitude). Le flux de B au travers de la section du solénoïde est donné par

$$\phi = \int_0^\pi f(\varphi) d\varphi.$$

Ces caractéristiques peuvent être retrouvées en écrivant l'équation $\text{rot}A = 0$ en coordonnées polaires ou sphériques, respectivement, et en tenant compte de la symétrie de

[†] \vec{e}_φ est un vecteur unitaire orthoradial appartenant au plan contenant l'axe du solénoïde et x (cf. (2.3.20)).

révolution. Le potentiel de Aharonov-Bohm (40) est un cas particulier du solénoïde infini correspondant à $f(\vartheta) = \phi/(2\pi)$ (dans ce cas la section du solénoïde est un disque de rayon constant). La famille considérée ici étant bien plus générale et contient en particulier des potentiels non-invariant par rotation.

On peut appliquer la démarche développée dans cette thèse à ces deux exemples qui vérifient toutes les hypothèses que l'on s'est fixé. De plus de par leur forme explicite on peut calculer "exactement" le symbole principal $s_0^b(b, \omega; \lambda) = \exp(i\Theta(b/\sqrt{\lambda}, \sqrt{\lambda}\omega, \sqrt{\lambda}\omega))$, $\langle b, \omega \rangle = 0$, de l'opérateur $S_0(\lambda)$. Celui-ci ne dépend pas de l'énergie λ et on trouve d'une part pour le solénoïde infini

$$\Theta(b/\sqrt{\lambda}, \sqrt{\lambda}\omega, \sqrt{\lambda}\omega) = \det(b, \omega) \int_{\theta_\omega - \pi}^{\theta_\omega} f(\vartheta) d\vartheta,$$

où θ_ω est l'angle polaire associé à ω , et d'autre part pour la bobine torique

$$\Theta(b/\sqrt{\lambda}, \sqrt{\lambda}\omega, \sqrt{\lambda}\omega) = \int_{\varphi_\omega}^{\pi - \varphi_\omega} f(\varphi) d\varphi,$$

où φ_ω est la colatitude associée à ω . En particulier la fonction $\Theta(b/\sqrt{\lambda}, \sqrt{\lambda}\omega, \sqrt{\lambda}\omega)$ ne tend pas vers l'infini quand $|b| \rightarrow \infty$ et ceci quelque soit $\lambda > 0$ puisque λ n'apparaît pas dans ces expressions. La fonction Θ admet ici une interprétation géométrique très simple : il s'agit de la circulation de A le long du contour formé par deux droites de direction ω l'une passant par l'origine (\mathcal{D}_0) l'autre par le point $b/\sqrt{\lambda}$ (\mathcal{D}_1) (cf. Figures 2.2 et 2.3). Cette remarque nous permet d'affirmer que les résultats des sections 2.3.2 et 2.3.3 sont conservés si on choisit une autre jauge que la jauge transverse pour A , la circulation de A le long des droites \mathcal{D}_0 et \mathcal{D}_1 étant égal au flux du champ magnétique B au travers de toute surface bordée par \mathcal{D}_0 et \mathcal{D}_1 . Dans tous ces cas le spectre essentiel de $S(\lambda)$ coïncide avec l'image par la fonction $\nu \mapsto \exp(i\nu)$ l'ensemble des valeurs prises par la fonction $\Theta(b/\sqrt{\lambda}, \sqrt{\lambda}\omega, \sqrt{\lambda}\omega)$. Cette fonction ne pouvant pas tendre vers ∞ lorsque $|b| \rightarrow \infty$ le spectre essentiel de $S(\lambda)$ peut ne pas recouvrir tout le cercle unité voire même, en dimension deux, être concentré en deux points ! Dans le cas du potentiel (40) on retrouve justement que le spectre essentiel de $S(\lambda)$ est concentré en deux points $\exp(\pm i\phi/2)$ et on peut retrouver la section efficace différentielle (41), modulo un terme de singularité plus faible, en calculant la transformée de Fourier (en la variable y) de la fonction (38). Par rapport aux autres méthodes l'avantage de l'approche développée dans cette thèse est que les résultats obtenus sont indépendants de ce qui se passe dans une boule, de rayon arbitraire, autour de l'origine et même de tous les termes qui ont un comportement à courte portée.

Ces quelques exemples montrent toute la diversité des résultats que l'on peut obtenir dans le cas des potentiels asymptotiquement homogènes de degré -1 contrastant avec les cas $\rho > 1$ et $1 > \rho > 0$. Il faut noter aussi que dans le cas où $A_L = 0$ et V_L est asymptotiquement homogène de degré -1 la fonction $\Theta(b/\sqrt{\lambda}, \sqrt{\lambda}\omega, \sqrt{\lambda}\omega)$ a en général une croissance logarithmique sauf pour les potentiels de type dipolaire, i.e. vérifiant pour tout $|x| \geq R > 0$, $V(-x) = -V(x)$. Mais pour ce type de potentiels le spectre de $S(\lambda)$ dépend de l'énergie λ contrairement au cas magnétique.

