

4. La mécanique semi-classique

Objektyp: **Chapter**

Zeitschrift: **L'Enseignement Mathématique**

Band (Jahr): **44 (1998)**

Heft 1-2: **L'ENSEIGNEMENT MATHÉMATIQUE**

PDF erstellt am: **21.07.2024**

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

4. LA MÉCANIQUE SEMI-CLASSIQUE

Pour cette section, voir [2], [25], [29], [32], [42], [44], [51].

4.1 INTRODUCTION

Du point de vue physique, la mécanique quantique est apparue comme nécessaire pour remplacer la mécanique classique dans certaines situations (atomes et molécules, physique des étoiles).

De même, l'optique géométrique doit être remplacée par une optique ondulatoire (Maxwell).

Le point commun est l'étude d'EDP linéaires dépendant d'un petit (ou grand) paramètre: équation de Schrödinger avec \hbar petit, grandes valeurs propres du laplacien riemannien, solutions à grandes fréquences des équations de Maxwell.

On peut aussi considérer de façon plus générale la dégénérescence de systèmes hamiltoniens (en dimension finie ou infinie) dépendant d'un *petit* paramètre vers d'autres systèmes hamiltoniens de dimension plus petite. La méthode de moyennisation est un peu le prototype de ces limites: les oscillations rapides du système (penser à un gyroscope) donnent lieu à un découplage entre une dynamique rapide et une dynamique lente qui est à nouveau hamiltonienne sur un espace des phases réduit.

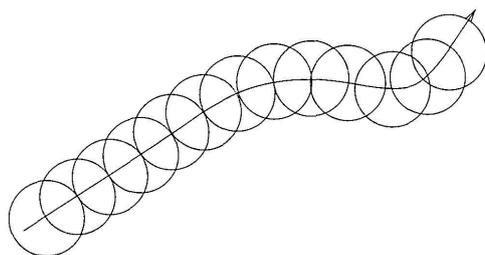


FIGURE 3

Méthode de moyennisation

Si on considère un hamiltonien

$$H_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} H_0 + H_1,$$

sur une variété symplectique de dimension $2n$ et qu'on suppose que les trajectoires de H_0 contenues dans la couche d'énergie E_0 sont périodiques de période T_0 , on peut introduire la variété symplectique Z_{E_0} de dimension

$2(n-1)$ des trajectoires de H_0 contenues dans la couche d'énergie E_0 et la munir de l'hamiltonien moyenné $K = \frac{1}{T_0} \int_{\gamma} H_1 dt$ décrivant une dynamique sur les trajectoires de H_0 . Cette dynamique décrit bien le comportement des trajectoires de H_ε dans un intervalle de temps de l'ordre de 1.

4.2 LA PHASE STATIONNAIRE

Voir [36].

Dans le cas qui nous préoccupe dans la suite (linéaire), ce découplage est une conséquence de la phase stationnaire: si on considère une intégrale oscillante du type:

$$I(h) = \int_{\mathbf{R}^n} e^{iS(x)/h} a(x) |dx|,$$

où $S: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ est C^∞ et $a \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n, \mathbf{C})$, le comportement asymptotique de $I(h)$ quand h tend vers 0 est contrôlé par les points critiques de S situés dans le support de a . Lorsque ceux-ci sont non dégénérés, on a une formule explicite pour le développement asymptotique. Les faits remarquables sont les suivants: le comportement est en $h^{n/2}$, il y a une phase liée à l'indice de la hessienne de S aux points critiques.

Plus précisément, si S n'a qu'un point critique supposé non dégénéré x_0 dans le support de a de signature σ , on a:

$$I(h) \sim (2\pi h)^{n/2} e^{iS(x_0)/h} e^{i\sigma\pi/4} \frac{a(x_0)}{|\det(S''(x_0))|^{1/2}}.$$

Le coefficient principal (amplitude) admet une interprétation géométrique comme densité relative de 2 mesures en x_0 : la mesure $a(x)dx$ et la mesure associée canoniquement à S'' (comme en riemannien). Cette remarque est à l'origine de la géométrisation du calcul des intégrales oscillantes.

Donnons 3 applications semi-classiques simples de la phase stationnaire:

EXEMPLE 4.1 (FOURIER ET LEGENDRE).

Soit $S: U \rightarrow \mathbf{R}$ une fonction C^∞ définie sur un ouvert $U \subset \mathbf{R}^n$ et supposons que $x \rightarrow S'(x)$ est un difféomorphisme C^∞ de U sur un ouvert V du dual de \mathbf{R}^n . Soit alors $\widehat{S}(\xi): V \rightarrow \mathbf{R}$ la transformée de Legendre de S caractérisée par

$$\{(x, S'(x)) \mid x \in U\} = \{(\widehat{S}'(\xi), \xi) \mid \xi \in V\},$$

normalisée par $\widehat{S}(\xi_0) + S(x_0) = x_0 \xi_0$ pour un point $\xi_0 = S'(x_0)$.

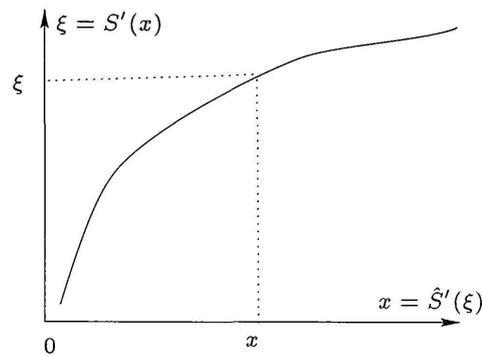


FIGURE 4

Transformation de Legendre

Soit $a \in C_0^\infty(U)$ et

$$\mathcal{F}_h \phi(\xi) = \int e^{-ix\xi/h} \phi(x) |d_h x|,$$

où $|d_h x|$ est une mesure de Haar sur \mathbf{R}^n normalisée pour que \mathcal{F}_h soit unitaire de $L^2(\mathbf{R}^n, |d_h x|)$ sur $L^2(\mathbf{R}^n, |d_h \xi|)$.

Alors

$$\mathcal{F}_h(a(x) e^{iS(x)/h})(\xi) \sim A(\xi) e^{-iS(\xi)/h},$$

où \widehat{S} est la transformée de Legendre de S .

On peut donc dire que la transformée de Legendre est la limite semi-classique de la transformée de Fourier.

EXEMPLE 4.2 (VITESSE DE PHASE ET VITESSE DE GROUPE).

Soit $a(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}$ une onde plane monochromatique de fréquence $\omega(k)$ dans \mathbf{R}^n . Sa vitesse de propagation est $v = \frac{k \omega(k)}{\|k\|^2}$. C'est la vitesse de déplacement des hyperplans d'égal phase

$$kx - \omega(k)t = \alpha_0,$$

souvent appelée vitesse de phase.

Si on prend une superposition de telles ondes de la forme

$$F(x, t) = \int a(k) e^{ikx - \omega(k)t} |dk|,$$

avec k grand, la fonction F est négligeable en dehors des points (x, t) tels que $x = \omega'(k)t$ qui se propagent à la vitesse $\omega'(k)$ appelée vitesse de groupe du paquet d'onde.

EXEMPLE 4.3 (PRINCIPE DE HUYGENS).

Considérons une onde sphérique de la forme

$$a(x) e^{ikr}$$

issue de l'origine. Soit maintenant Σ une surface et considérons une superposition d'ondes sphériques émises par les points de Σ de la forme

$$F(M) = \int_{\Sigma} e^{ikd(P,M)} a(P) |dP|.$$

Le comportement asymptotique lorsque k est grand est négligeable sauf si M est sur une normale à Σ . La phase est alors donnée à une constante près par

$$kd(A, M) - n(M) \frac{\pi}{2},$$

à condition que M ne soit pas un point focal, et où $n(M)$ est l'indice de Morse de la fonction distance.

On voit donc qu'aux grandes fréquences le front d'onde (phases constantes) est l'enveloppe des fronts sphériques issus de Σ , ce qui est le principe de Huygens en optique géométrique.

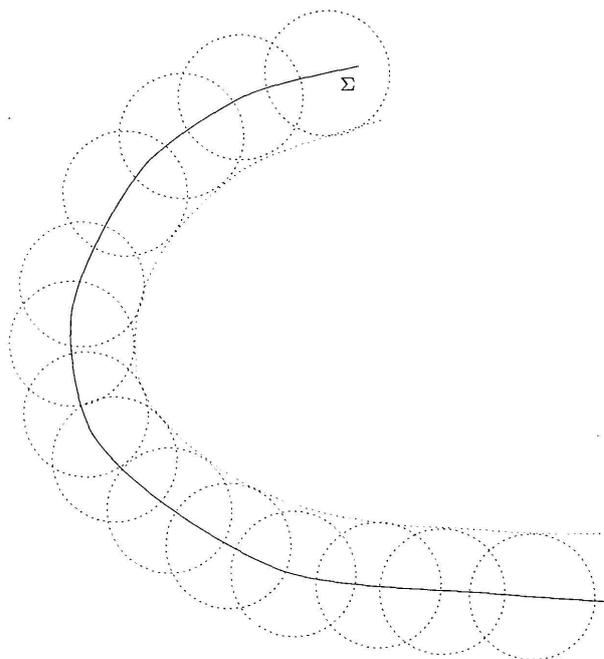


FIGURE 5
Principe de Huygens

4.3 EDP LINÉAIRES AVEC UN PETIT PARAMÈTRE

En général, on étudiera une équation du type :

$$P(h, x, \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial x}) = \sum_{|\alpha| \leq N} a_\alpha(x, h) (\frac{h}{i} \partial_x)^\alpha,$$

où les $a_\alpha(x, h)$ sont de la forme :

$$a_\alpha(x, h) = \sum_{j \geq 0} b_{\alpha, j}(x) h^j.$$

On définit alors

$$P_0(x, \xi) = \sum b_{\alpha, 0} \xi^\alpha,$$

qui est appelé symbole principal de P . On supposera dans ce qui suit que P_0 ne prend que des valeurs réelles.

Le but est de décrire les (des) solutions de

$$P_h u_h = O(h^\infty).$$

EXEMPLE 4.4.

$$P = -\frac{h^2}{2} \Delta + V - E, \quad P_0 = \frac{1}{2} \|\xi\|^2 + V(x) - E,$$

(valeurs propres de Schrödinger).

$$\frac{h}{i} \frac{du}{dt} = -\frac{h^2}{2} \Delta u + Vu, \quad P_0 = \tau - H(x, \xi),$$

(Schrödinger dépendant du temps).

$$\lambda^{-2} \Delta_g - 1, \quad P_0 = g^*(x, \xi) - 1,$$

(grandes valeurs propres du laplacien).

LES SOLUTIONS BKW

On considère l'action de P sur une fonction oscillante et on développe en puissances de h :

$$P(a(x) e^{iS(x)/h}) = e^{iS(x)/h} (P_0(x, S'(x))a(x) + \frac{h}{i} (\mathcal{X}a(x) + P_1(x, S'(x))a(x)) + O(h^2))$$

où $\mathcal{X} = \sum \partial_{\xi_i} P_0(x, S'(x)) \partial_{x_i}$ et $P_1(x, \xi)$, le symbole sous-principal de P , est une fonction sur T^*X .

Résoudre $P(ae^{iS/h}) = O(h^2)$ équivaut donc à résoudre l'équation eiconale $P_0(x, S'(x)) = 0$, puis une équation différentielle le long des trajectoires de \mathcal{X} . Ces deux opérations gardent un sens pour les solutions généralisées, en particulier, \mathcal{X} est la projection sur X de \mathcal{X}_{P_0} et donc on peut lire les équations de transport sur la variété lagrangienne.

Dans le cas de Schrödinger, l'équation de transport s'écrit :

$$\mathcal{X}a + \frac{1}{2}\Delta S a = 0.$$

Elle s'interprète géométriquement comme l'invariance par le flot hamiltonien de la demi-densité $a(x)|dx|^{1/2}$. Le carré $a(x)^2|dx|$ s'interprète bien en mécanique quantique comme une mesure : la probabilité de présence de la particule.

Pour mettre tout cela en place, on associe, à la représentation de L à partir d'une famille de fonctions, des superpositions de fonctions oscillantes

$$f(x) = \int e^{i\varphi(x,\theta)/h} a(x,\theta) d\theta.$$

EXEMPLE 4.5 (LA FONCTION DE AIRY). *On définit*

$$Ai_h(x) = (2\pi h)^{-\frac{1}{2}} \int_{\mathbf{R}} e^{i(x\xi - \frac{\xi^3}{3})/h} d\xi = h^{-1/6} Ai(xh^{-2/3}).$$

Cette fonction est associée à la variété lagrangienne

$$x = \xi^2$$

qui admet une caustique en $(0,0)$.

La fonction de Airy décrit en fait le comportement universel des intégrales oscillantes associées aux singularités plis.

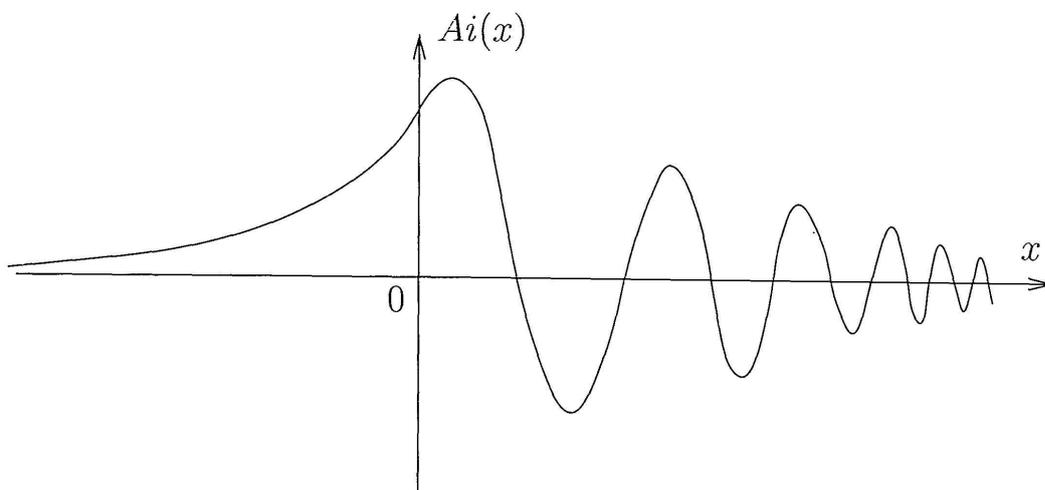


FIGURE 6
La fonction de Airy

Le résultat net est la possibilité d'associer à toute variété lagrangienne L vérifiant $(P_0)|_L = 0$ des solutions locales de $Pu = O(h^2)$ et même $O(h^\infty)$ si on réfléchit un peu.

Ces solutions ne se globalisent pas toujours: ce sont les conditions de quantification.

Dans les cas les plus simples, par exemple dans les exemples 4.6 et 4.7, il s'agit d'une condition portant uniquement sur L : la classe de cohomologie de de Rham de la forme de Liouville $\alpha = \xi dx$ satisfait des conditions d'intégralité du type

$$[\alpha] \in 2\pi h(\mathbf{Z}^n + \mu),$$

où $\mu \in \frac{1}{4}\mathbf{Z}^n$ est l'indice de Maslov.

En effet, une fois l'existence d'une densité invariante assurée, il reste le problème des phases qui sont données localement par S dont la différentielle est la restriction à L de α (on retrouve la définition des fronts d'ondes comme feuilles de phases constantes). La contribution des caustiques est donnée par l'indice de Maslov qui a son origine technique dans la phase stationnaire.

EXEMPLE 4.6 (LES SÉRIES DE FOURIER). On considère l'opérateur $\frac{h}{i}\partial_x$ sur $\mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$. Son symbole principal est ξ et la condition de quantification sur la variété $\xi = a$ est

$$2\pi a = 2\pi h n,$$

soit $a = hn$. On retrouve comme spectre les hn , $n \in \mathbf{Z}$ et les séries de Fourier.

EXEMPLE 4.7 (L'OSCILLATEUR HARMONIQUE).

$$\widehat{H} = \frac{1}{2}(-\partial_x^2 + x^2).$$

Le symbole principal est

$$\frac{1}{2}(x^2 + \xi^2)$$

et les conditions de quantification s'écrivent pour la variété $H = E$:

$$2\pi E = 2\pi h(n + \frac{1}{2}).$$

Elles donnent le spectre exact:

$$E_n = h(n + \frac{1}{2}).$$

Cela n'est pas surprenant, car le changement $x = \sqrt{h}x_1$ transforme \widehat{H}_h en $h\widehat{H}_1$.

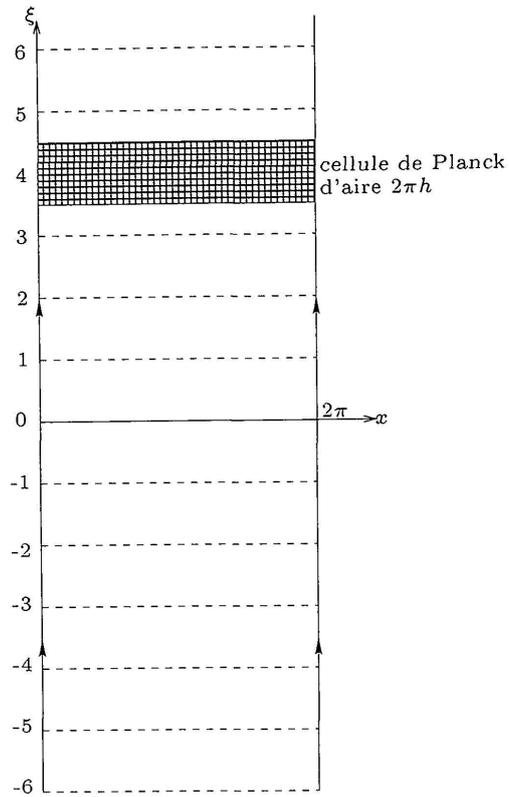


FIGURE 7
L'espace de phase des séries de Fourier

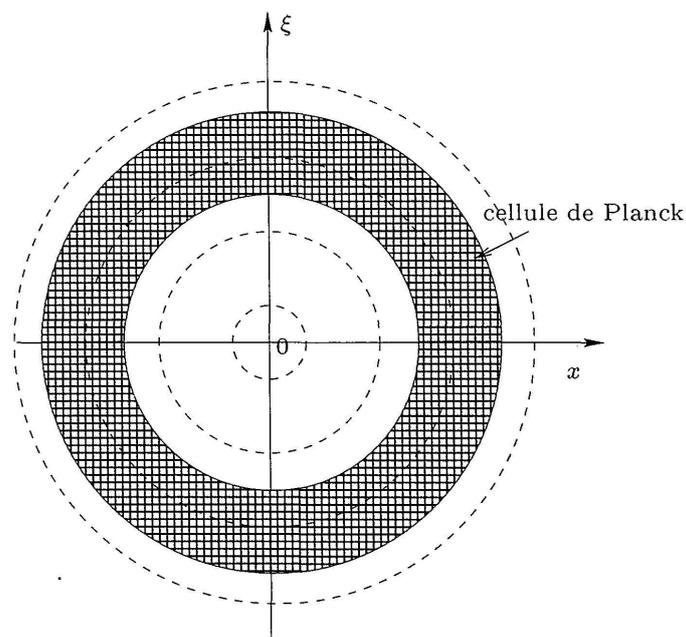


FIGURE 8
L'espace des phases de l'oscillateur harmonique

4.4 LE CAS DE SCHRÖDINGER ET L'INTÉGRALE DE FEYNMAN

Voir [27], [13].

Dans le cas de Schrödinger dépendant du temps, on obtient une représentation à la Feynman :

$$p(t, x, y) = \int_{\Omega_{t,x,y}} e^{i \int_0^t \mathcal{L}(\gamma(s), \gamma'(s)) ds / \hbar} d\gamma .$$

Bien sûr, cette intégrale n'a pas de statut mathématique bien solide, contrairement à la mesure de Wiener. On doit comprendre $d\gamma$ comme une mesure de Lebesgue.

5. LE SPECTRE SEMI-CLASSIQUE

5.1 LA FORMULE DE WEYL

Voir [8], [32].

On considère le spectre de l'opérateur de Schrödinger dans \mathbf{R}^n

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V - E ,$$

où on suppose $V \in C^\infty$ et $\liminf_{x \rightarrow \infty} V \geq 0$. Alors le spectre négatif de \widehat{H} est discret; on l'écrit :

$$E_1(\hbar) < E_2(\hbar) \leq \dots .$$

Si $E < 0$, on considère le comportement asymptotique semi-classique de

$$N_\hbar(E) = \#\{j \mid E_j(\hbar) \leq E\} .$$

Il se trouve que l'asymptotique de $N_\hbar(E)$ est purement classique

$$N_\hbar(E) \sim \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \text{vol}(\{P_0(x, \xi) \leq E\}) ,$$

ce qui signifie que chaque état propre *occupe* une région de volume $(2\pi\hbar)^{n/2}$ de l'espace des phases. C'est une des versions de la correspondance entre volume et dimension. Cela permet parfois de déterminer le \hbar effectif d'un problème de type semi-classique.

De nombreux auteurs se sont préoccupés d'obtenir des estimations du reste du type

$$N_\hbar(E) = Ch^{-n}(1 + O(\hbar^\alpha)) .$$