

# RÉSONANCES POUR DES OPÉRATEURS DE SCHRÖDINGER MATRICIELS

*Laurence Nedelec*

## 1. Introduction aux opérateurs de Schrödinger stationnaires

Le laplacien noté  $\Delta$  est l'opérateur qui à une fonction  $f$  de plusieurs variables  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  associe la fonction

$$\Delta f = \sum_{j=1}^{j=n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} f.$$

Celui-ci apparaît dans plusieurs modèles de physique, dont je vais citer quelques cas.

Soit une onde représentée par une fonction (appelée fonction d'onde)  $u(x, t)$  où  $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ ,  $t \in \mathbb{R}$  (pour fixer les idées le réel  $u(x, t)$  représente le déplacement vertical d'une membrane au-dessus du point  $x$  du plan horizontal, au temps  $t$ ). L'équation communément utilisée pour modéliser le déplacement des membranes vibrantes en l'absence d'interaction avec le reste du monde, est

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = h^2 \Delta u(x, t).$$

Le paramètre  $h > 0$  dépend lui des caractéristiques physiques de la membrane. (Remarque : il est simple, si  $n = 1$ , de montrer que les solutions de classe  $C^2$  de cette équation s'écrivent sous la forme  $f(x + ht) + g(x - ht)$  où  $f$  et  $g$  sont deux fonctions  $C^2$ .) L'équation des ondes de lumière est aussi  $\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = h^2 \Delta u(x, t)$ , où  $h$  est un autre paramètre. L'équation de la diffusion est  $\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = h^2 \Delta u(x, t)$ , tandis que l'équation décrivant l'évolution d'un système quantique sans interaction est

$$h \frac{\partial}{i \partial t} u(x, t) = h^2 \Delta u(x, t),$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck. Dès que les ondes interagissent avec un milieu il faut modifier ces équations en y ajoutant par exemple un potentiel électrique ou magnétique. La dernière équation, modifiée par un potentiel électrique, devient l'équation

$$(1) \quad \hbar \frac{\partial}{i\partial t} u(x, t) = \hbar^2 \Delta u(x, t) - V(x)u(x, t)$$

où  $V$  est une fonction appelée potentiel.

La plupart du temps on résout un problème de Cauchy : rechercher une solution  $u(x, t)$  de l'une des équations précédentes et vérifiant la condition initiale  $u(x, 0) = u_0(x)$ ,  $u_0(x)$  étant une fonction donnée.

Pour résoudre ces problèmes, on décompose en général la fonction  $u(x, 0)$  sur une base des vecteurs propres de l'opérateur  $-\hbar^2 \Delta + V$ , appelé opérateur de Schrödinger, ce qui permet ensuite de faire une étude simple de l'évolution en temps.

Par exemple si  $u_0(x)$  est un vecteur propre de  $-\hbar^2 \Delta + V$  associé à la valeur propre  $\lambda$  (i.e.  $(-\hbar^2 \Delta + V)u_0(x) = \lambda u_0(x)$ ), alors la fonction  $u(x, t) = e^{i\lambda t} u_0(x)$  est solution de l'équation d'évolution (1). L'étude du spectre de l'opérateur  $-\hbar^2 \Delta + V$  est ainsi justifiée.

## 2. L'opérateur matriciel

Les opérateurs de Schrödinger étudiés ici sont les opérateurs :

$$P_{\hbar} = \begin{pmatrix} -\hbar^2 \Delta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\hbar^2 \Delta & \dots & 0 \\ & \dots & & \\ & \dots & & \\ 0 & \dots & 0 & -\hbar^2 \Delta \end{pmatrix} + V(x)$$

où  $\hbar$  est une petite constante strictement positive,  $x \in \mathbb{R}^n$ , et  $V(x) = (V_{i,j})_{(i,j) \in \{1, \dots, r\}^2}$  une matrice hermitienne de taille  $r$ . On note aussi  $P_{\hbar} = -\hbar^2 \Delta \otimes I_r + V(x)$  où  $I_r$  est la matrice identité de taille  $r$ .

## 3. Motivation

De tels opérateurs se rencontrent dans divers modèles de physique, par exemple l'approximation de Born-Oppenheimer qui modélise l'opérateur  $-\hbar^2 \Delta_x - \Delta_y + W(x, y)$  avec  $\hbar$  petit, ou bien l'approximation d'un opérateur de Schrödinger périodique à deux variables. (En gros, les particules de probabilité de présence  $\varphi(y)$  à la position  $y$  ne voient pas bouger les particules associées à  $x$  car ces dernières sont trop lentes, la vitesse étant liée au paramètre  $\hbar$ ). La justification de l'approximation a été faite dans diverses situations [4] [1]. Les matrices  $V$  intéressantes à regarder sont celles qui ne sont pas diagonalisables de manière régulière, sinon on se ramène

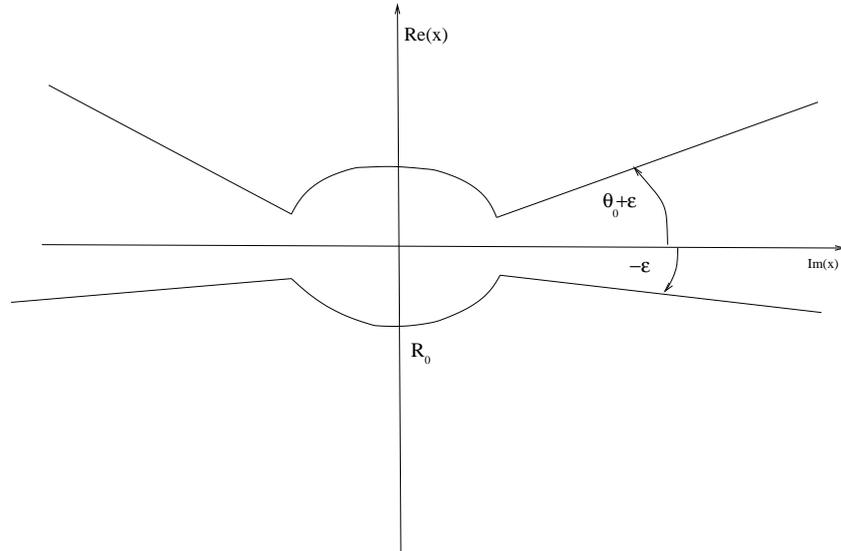
à un problème de dimension un. Les matrices  $V$  modèles que l'on rencontre le plus couramment sont

$$V_1(x) = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 + ix_3 \\ x_2 - ix_3 & -x_1 \end{pmatrix}, \quad x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3,$$

et

$$V_2(x) = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ x_2 & -x_1 \end{pmatrix}, \quad x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2.$$

Les résonances sont par définition les pôles d'une extension méromorphe de la résolvante  $R(z) = (P_h - z)^{-1}$  définie dans le demi plan  $\text{im}(z) > 0$  [3], [9]. C'est une généralisation naturelle de la notion de valeur propre d'un opérateur. Notons  $\text{res}(P_h)$  l'ensemble des résonances de  $P_h$ . Pour définir les résonances, on suppose que  $V$  se prolonge analytiquement dans un domaine  $S \subset \mathbb{C}^n$  de la forme



C'est-à-dire :

$$S = \{\rho w \mid w \in \mathbb{R}^n, \text{dist}(w, \mathbb{S}^{n-1}) < \epsilon, \rho \in \mathbb{C}, |\rho| > R, \arg \rho \in [-\epsilon, \theta_0 + \epsilon]\} \\ \cup \{\rho w \mid w \in \mathbb{S}^{n-1}, \rho \in \mathbb{C}, |\rho| < R_0\}$$

avec  $\theta_0 > 0$ .

#### 4. Résultats

Une classification des propriétés des matrices  $V$  « non diagonalisables » pouvant générer des résonances a été faite dans [5]. On traite ici l'un des cas classifié incluant les matrices  $V_1$  et  $V_2$ . Supposons :

**(H1)**  $r = 2$ .

Il existe donc des fonctions réelles  $(a_j)_{j \in \{1,2,3\}}$  et  $b$  telles que

$$V(x) = b(x)I_2 + \begin{pmatrix} a_1(x) & a_2(x) + ia_3(x) \\ a_2(x) - ia_3(x) & -a_1(x) \end{pmatrix}$$

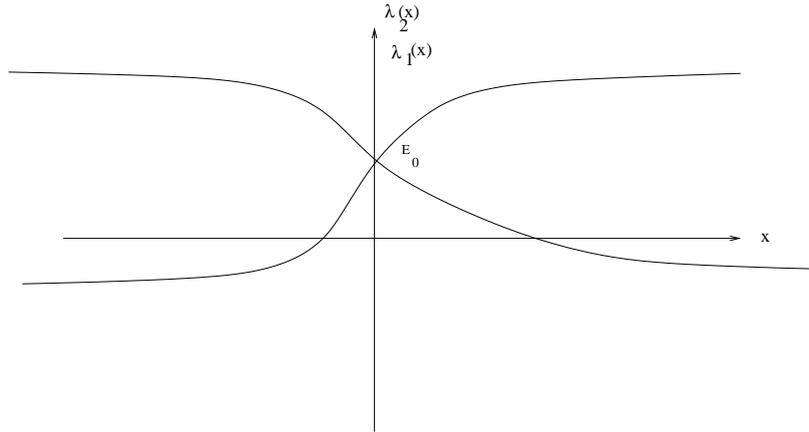
(i.e.  $b(x) = \text{tr } V(x)$ ).

**(H2)** Il existe une matrice constante  $V_0$  et  $n_0 \in \mathbb{R}$ ,  $n_0 > n$ , tels que  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = V_0$  et  $\|V(x) - V_0\| \leq C \langle x \rangle^{-n_0}$  où  $\langle x \rangle = (1 + |x|^2)^{\frac{1}{2}}$  pour  $x \in \mathcal{S}$ .

**(H3)**  $V(0)$  a une valeur propre double  $E_0 \in \mathbb{R}$ , c'est-à-dire  $V(0) = E_0 I_2$ , et  $E_0$  n'est pas une valeur propre de  $V_0$ .

**(H4)**  $\nabla a_j(0)$  sont linéairement indépendantes pour  $j \in \{1, 2, 3\}$  si  $n = 3$  et pour  $j \in \{1, 2\}$  si  $n = 2$  et  $|\nabla a_j b(0)| < 1$  ( $\nabla a_j$  représente le gradient dans les coordonnées  $a_j$ ) (si  $n = 2$  on ajoute l'hypothèse  $a_3 = 0$ ).

L'allure des courbes des valeurs propres de  $V(x)$  est donnée dans le graphique suivant :



Notons  $P_0 = -h^2 \Delta_x \otimes I_r + V_0(x)$ . Le résultat suivant permet de localiser les résonances et d'estimer leur nombre au voisinage d'un point.

**Théorème 1.** — *Sous les hypothèses (H1)–...–(H4) on a les résultats suivants.*

*Soit  $n = 3$ . Pour tout voisinage  $W$  de  $E_0$  il existe  $h_0 > 0$  et  $C > 0$  tels que, pour tout  $h$ ,  $0 < h < h_0$ , alors  $\text{card}\{\text{res}(P_0) \cap W\} \geq Ch^{-1} |\ln h|^{-3/2}$ .*

*Soit  $n = 2$ . Pour tout voisinage de  $E_0$  il existe  $h_0 > 0$  et  $C > 0$ ,  $c > 0$  tels que, pour tout  $h$ ,  $0 < h < h_0$ , alors  $ch^{-2} \leq \text{card}\{\text{res}(P_0) \cap W\} \leq Ch^{-2}$ .*

Le résultat connu pour des potentiels généraux est que le nombre de résonances près d'un point est majoré par  $O(h^{-n})$  (formule de Weyl). En dimension un on peut parfois avoir des résultats plus précis [6].

### 5. Plan de la démonstration du théorème 1

– On commence par donner l'expression du développement en puissances de  $h$  de la distribution  $f \rightarrow \text{tr}(f(P_h) - f(P_0))$  en utilisant le calcul pseudo-différentiel [7]. On trouve

$$\text{tr}(f(P_h) - f(P_0)) = \begin{cases} C(f)h^{-n} + \text{reste} & \text{si } n = 2, \\ \text{tr}(f(P_h) - f(P_0)) = C(f)h^{-n+2} + \text{reste} & \text{si } n = 3, \end{cases}$$

avec une expression explicite pour  $C(f)$ .

– On utilise la formule de trace locale de Sjöstrand [8], qui donne le résultat  $\text{tr}(f(P_h) - f(P_0)) = \sum_{z_j \in \text{res } P_h} f(z_j) + \text{reste}$ . Cette formule est une généralisation des deux formules suivantes, mais où l'on perd un reste :

Si  $P$  est un opérateur autoadjoint (pas forcément compact)

$$\text{tr } P = \sum_{z_j \text{ valeur propre } P} z_j.$$

Si  $P$  est un opérateur compact (pas forcément autoadjoint)

$$\text{tr } P = \sum_{z_j \text{ valeur propre } P} z_j$$

(théorème de Lidskii [2]).

– On choisit une fonction  $f$  dépendant de  $h$  si  $n = 3$  de la forme  $f(z, h) = e^{i \ln(h)(z-E_0)} e^{\ln(h)(z-E_0)^2}$ , et indépendante de  $h$  si  $n = 2$ . Les termes de reste dans la formule ci-dessus sont contrôlés par des normes de  $f$ . On obtient une estimation de la forme

$$\sum_{z_j \in \text{res } P_h} f(z_j) \geq C(h),$$

dont on déduit aisément le théorème, en utilisant le fait que la fonction  $f$  choisie vaut 1 en  $E_0$ .

### Références

- [1] J.M. Combes, P. Duclos, R. Seiler. The Born-Oppenheimer approximation. *Rigorous Atomic and Molecular Physics*, 185–212 (1981).
- [2] I.C. Gohberg, M.G. Krein. Introduction à la théorie des opérateurs linéaires non autoadjoints. Dunod, 1972.
- [3] B. Helffer, A. Martinez. Comparaison entre les diverses notions de résonances. *Helvetica Physica Acta* **60**, 992–1003 (1987).
- [4] M. Klein, A. Martinez, R. Seiler, X.P. Wang. On the Born-Oppenheimer expansion for polyatomic molecules. *Comm. Math. Phys.* **143**, 607–639 (1992).
- [5] L. Nedelec. Resonances for matrix Schrödinger operators. *Duke Mathematical Journal* **106** 2, 209–236 (2001).
- [6] T. Ramond, S. Fujiee. Matrice de scattering et résonances associées à une orbite hétérocline. *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.* **9**, 31–82 (1998).

LAURENCE NEDELEC

- [7] D. Robert. *Autour de l'approximation semi-classique*. Progress in Mathematics, Birkhäuser, 1983.
- [8] J. Sjöstrand. Resonances for bottles and trace formulae. *Math. Nachrichten* **221**, 95–149 (2001).
- [9] J. Sjöstrand, M. Zworski. Complex scaling and the distribution of scattering poles. *J. Amer. Math. Soc.*, **4** 4, 729–769, (1991).

*Laurence Nedelec*

IUFM de Rouen et Institut Galilée, Laboratoire d'Analyse Géométrie et Applications,  
Université Paris-Nord, 99, Avenue Jean-Baptiste Clément, 93430 Villetaneuse.

*E-mail* : nedelec@math.univ-paris13.fr