PHYSIQUE MATHÉMATIQUE. — *Asymptotique de la phase de diffusion pour l'opérateur de Schrödinger avec potentiel.* Note (*) de **Laurent Guillopé,** transmise par Bernard Malgrange.

Soit $s(\lambda)=(1/2\,i\,\pi)$ Log det $\mathscr{S}(\lambda)$ la phase de diffusion pour l'opérateur de Schrödinger $H=-\Delta+q$ dans $\mathbb{R}^{2m+1}$ $m>0)$ avec potentiel q C^∞ à support compact. La phase $s(\lambda)$ admet un développement asymptotique aux hautes énergies. Avec une formule de trace, on précise la forme de ce développement et on établit des identités de trace déterminant les valeurs propres de l'hamiltonien H à partir de la phase de diffusion.

Let $s(\lambda)=(1/2\,i\,\pi)$ Log det $\mathscr{S}(\lambda)$ *be the scattering phase for the Schrödinger operator* $H=-\Delta+q$ *in* $\mathbb{R}^{2m+1}$ $(m>0)$ *with q, a* C^∞ *compactly supported potential. Then the phase* $s(\lambda)$ *admits an asymptotic expansion at high energies. With a trace formula, we specify the form of this expansion and establish trace identities which determine the eigenvalues of the Hamiltonian* H *from the scattering phase.*

L'objectif de cette Note est d'établir l'existence d'un développement asymptotique pour la phase de diffusion relative à l'opérateur de Schrödinger $H=-\Delta+q$ dans $\mathbb{R}^n$ (n impair) où q est un potentiel C^∞ à support compact et d'en préciser les coefficients. On trouve dans [4] le cas de la diffusion sur la droite ($n=1$) tandis que [10] présente des résultats analogues pour la diffusion par un obstacle compact.

1. Préliminaires. — Le spectre de l'hamiltonien $H(H_0=-\Delta)$ de domaine l'espace de Sobolev $H^2(\mathbb{R}^n)$ (n quelconque) est constitué d'un spectre ponctuel fini $\{\lambda_j\}$ contenant N valeurs propres négatives ou nulles et d'un spectre absolument continu s'étalant sur $\mathbb{R}^+$ (*cf.* [11]).

Pour deux opérateurs auto-adjoints A et B, notons, s'ils existent, $W_\pm(A, B)$ les opérateurs d'onde $W_\pm(A, B)=s-\lim_{t\to\pm\infty} e^{itB}e^{-itA}P_{ac}(A)$ où $P_{ac}(A)$ est la projection sur le sous-espace d'absolue continuité de A, $S(A, B)=W_-^*(A, B)\,W_+(A, B)$ l'opérateur de diffusion associé et $\mathscr{S}(\lambda, A, B)$ la matrice de diffusion.

Avec nos hypothèses, si on note $R_{(0)}(E)=(H_{(0)}-E)^{-1}$, $e(n)$ la partie entière de $n/2$ si $n\geqq 2$ et $e(1)=1$, l'opérateur $R(E)^{e(n)}$ (où E est réel hors du spectre de H) est une perturbation auto-adjointe à trace de $R_0(E)^{e(n)}$: ainsi, d'après la théorie de la diffusion avec condition de trace (*cf.* [9] et [11]), les opérateurs d'onde $W_\pm(R_0(E)^{e(n)}, R(E)^{e(n)})$, $W_\pm(H_0, H)$ existent et sont complets, la matrice de diffusion $\mathscr{S}(\lambda, R_0(E)^{e(n)}, R(E)^{e(n)})$ est une perturbation à trace de l'identité et il résulte de l'invariance des opérateurs d'onde l'équivalence unitaire de $\mathscr{S}(\lambda, H_0, H)^*$ et $\mathscr{S}((\lambda-E)^{-e(n)}, R_0(E)^{e(n)}, R(E)^{e(n)})$. Si on note :

$$\Delta_E(z)=\det[1+(R(E)^{e(n)}-R_0(E)^{e(n)})(R_0(E)^{e(n)}-z)^{-1}],$$

la valeur au bord $\xi_E(\lambda)=\lim_{z\to\lambda,\ \mathrm{Im}\,z>0} 1/\pi \operatorname{Arg}\Delta_E(z)$ existe presque partout sur $\mathbb{R}$; la fonction ξ_E est dite fonction de déphasage spectral.

2. La formule de trace.

Théorème. — *Soit* Φ *une fonction de la classe* $\mathscr{S}(\mathbb{R})$ *de Schwartz. L'opérateur* $\Phi(H)-\Phi(H_0)$ *est à trace et :*

$$\text{(T)}\quad \operatorname{Tr}\{\Phi(H)-\Phi(H_0)\}=\sum_j \Phi(\lambda_j)+\frac{1}{2i\pi}[\operatorname{Log}\det\mathscr{S}(\lambda, H, H_0)]\,\Phi(0)$$
$$+\frac{1}{2i\pi}\int_0^\infty \Phi(\lambda)\frac{d}{d\lambda}\operatorname{Log}\det\mathscr{S}(\lambda, H, H_0)\,d\lambda.$$

Ce résultat est démontré en appliquant la formule de trace de Krein (*cf.* [8]), établie pour une perturbation auto-adjointe à trace d'un opérateur auto-adjoint borné, à l'opérateur $R(E)^{e(n)}$. La formule de trace (T) résulte alors de l'étude de la fonction de déphasage spectral ξ_E que les résultats d'Agmon (*cf.* [1]) sur les valeurs au bord des résolvantes $R_{(0)}(\lambda \pm i\,0)$ d'une part, de Jensen-Kato (*cf.* [5], [6], [7]) sur le comportement de $R(\zeta)$ aux basses énergies d'autre part, permettent d'effectuer :

Proposition. — 1. *ξ_E est localement constante sur le complémentaire du spectre de* $R(E)^{e(n)}$. *Pour une valeur propre λ non nulle de H de multiplicité $\nu(\lambda, H)$, on a* $\xi_E((\lambda-E)^{-e(n)}-)-\xi_E((\lambda-E)^{-e(n)}+)=\nu(\lambda, H)$;

2. *ξ_E est continue sur* $\mathring{\sigma}_{ac}(R(E)^{e(n)})=]0, (-E)^{-e(n)}[$;

3. *ξ_E admet une limite à gauche en* $(-E)^{-e(n)}$. *Le saut* $\xi_E((-E)^{-e(n)}-)-\xi_E((-E)^{-e(n)}+)$ *est génériquement égal en dimension* $n \geqq 2$ (resp. $n=1$) *à la multiplicité* $\nu(0, H)$ (resp. $-1/2$).

Des situations exceptionnelles, correspondant à des résonances (*cf.* [5], [6]) peuvent intervenir en basses dimensions ($n \leqq 4$). En dimension 1 (3, 4 resp.), la résonance lorsqu'elle a lieu, peut être considérée pour l'évaluation de la discontinuité $\xi_E((-E)^{-e(n)}-)-\xi_E((-E)^{-e(n)}+)$ comme une valeur propre de multiplicité 0 (1/2, 1 resp.). En dimension 2, l'interprétation, plus délicate, de cette discontinuité n'a pas été complètement effectuée. On choisira, dans la formule (T), la détermination du Log telle que :

$$\xi_E((-E)^{-e(n)}-)-\xi_E((-E)^{-e(n)}+)=\nu(0, H)+\frac{1}{2i\pi}\operatorname{Log}\det \mathcal{S}(\lambda, H, H_0).$$

Le déterminant de la matrice de diffusion est relié à la fonction de déphasage spectral suivant :

$$\det \mathcal{S}(\lambda, R_0(E)^{e(n)}, R(E)^{e(n)})=\lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{\Delta_E(\lambda+i\varepsilon)}{\Delta_E(\lambda-i\varepsilon)}=e^{2i\pi\xi_E(\lambda)}.$$

D'autre part, la propriété d'invariance des opérateurs d'onde entraîne l'égalité $\det \mathcal{S}(\lambda, H_0, H)=e^{-2i\pi\xi_E((\lambda-E)^{-e(n)})}$. On en déduit la proposition :

Proposition. — *Soit une factorisation $q=q_1 q_2$ avec $|q|=|q_i|^2$ $(i=1, 2)$ et p un entier supérieur à $n/2$. On a la formule :*

$$\text{(S)}\quad \det \mathcal{S}(\lambda, H_0, H)=\frac{\det_p 1+q_1 R_0(\lambda+i\,0)q_2}{\det_p 1+q_1 R_0(\lambda-i\,0)q_2}\exp\sum_{l=1}^{p-1}\frac{(-1)^{l+1}}{l}\operatorname{Tr}\{[q_1 R_0(\lambda+i\,0)q_2]^l -[q_1 R_0(\lambda-i\,0)q_2]^l\},$$

où $\det_p$ *désigne le déterminant régularisé d'indice* p (cf. [12]).

Remarques. — 1. En dimension $n=1$, la formule de trace a été établie suivant des techniques élémentaires d'équations différentielles (*cf.* [2]).

2. La formule de trace ainsi que la formule (5) restent valables pour des potentiels à portée « suffisamment courte » (potentiels à décroissante polynomiale assez forte par exemple). La fonction de déphasage spectral est analytique pour des potentiels à décroissance exponentielle (i. e. $\operatorname{Sup}|e^{a|x|}q(x)|<\infty$ pour un a positif).

3. Asymptotique de la phase de diffusion. — On suppose désormais la dimension n impaire. Notons $s(\lambda)=1/2\,i\pi\operatorname{Log}\det \mathcal{S}(\lambda, H, H_0)$ la phase de diffusion.

Proposition. — *En dimension n impaire, la phase de diffusion $s(\lambda)$ admet aux hautes énergies un développement asymptotique, dérivable à tout ordre, en puissance de* $\sqrt{\lambda}$.

L'existence de ce développement résulte de l'étude, relativement technique, de chaque facteur de l'expression (S).

On sait par ailleurs (*cf.* [3]) que $Z(t)=\mathrm{Tr}\{e^{-tH}-e^{-tH_0}\}$ admet un développement asymptotique $Z(t)\sim(4\pi t)^{-n/2}\sum_{i=1}^{\infty}a_i t^i$ lorsque t tend vers 0^+, où les a_i sont des intégrales de fonctionnelles polynomiales universelles de q et de ses dérivées $\left(a_1=-\int_{\mathbb{R}^n}q(x)\,dx,\ a_2=1/2\int_{\mathbb{R}^n}q^2(x)\,dx,\ \ldots\right)$. La formule de trace (T) pour l'opérateur de la chaleur permet alors de préciser la forme du développement asymptotique aux hautes énergies de la phase de diffusion :

THÉORÈME :

1. $$s(\lambda)\underset{\lambda\to\infty}{\sim}\left(\frac{\lambda}{4\pi}\right)^{n/2}\sum_{l=1}^{[n/2]}\frac{a_l}{\Gamma(n/2-l+1)}\lambda^{-l}-\mathrm{N}-\left(\frac{\lambda}{4\pi}\right)^{n/2}\sum_{l=[n/2]+1}^{\infty}\frac{a_l}{\Gamma(n/2-l+1)}\lambda^{-l}.$$

2. *Pour* ν *entier on a les identités de trace :*

$$(\mathrm{T}_\nu)\sum_j\lambda_j^\nu=-\int_0^\infty\lambda^\nu\frac{d}{d\lambda}\left[s(\lambda)-\left(\frac{\lambda}{4\pi}\right)^{n/2}\sum_{l=1}^{[n/2]+\nu}\frac{a_1}{\Gamma(n/2-l+1)}\lambda^{-l}\right]d\lambda.$$

Remarques. — 1. Les identités de trace (T_ν) obtenues en remarquant l'absence de puissances entières de t dans le développement de $Z(t)$ sont équivalentes au fait que la fonction zêta $\zeta_E(s)=\mathrm{Tr}\{(H-E)^{-s}-(H_0-E)^{-s}\}$ admet comme zéros les entiers négatifs. Ces identités de trace déterminent les valeurs propres de l'hamiltonien H à partir de la phase de diffusion.

2. En dimension paire, la phase de diffusion est à croissance polynomiale et vérifie $\int^\infty|s(\lambda)|\lambda^{-n/2-1}\,d\lambda<\infty$.

(*) Remise le 30 novembre 1981.

[1] S. AGMON, *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa*, IV, n° 2, 1975, p. 151-218.
[2] Y. COLIN DE VERDIÈRE, *Séminaire Bourbaki*, exposé n° 557.
[3] Y. COLIN DE VERDIÈRE, *Annales de l'E.N.S.*, 14, 1981, p. 27-39.
[4] P. FADEEV et V. ZAHKAROV, *Func. Anal. Appl.*, 5, 1971, p. 280-288.
[5] A. JENSEN, *Duke Math. J.*, 46, 1979, p. 57-81.
[6] A. JENSEN, Preprint, University of Kentucky.
[7] A. JENSEN et T. KATO, *Duke Math. J.*, 46, 1979, p. 583-612.
[8] M. G. KREIN, *Mat. Sb.* 33.75, 1953, p. 597-626.
[9] M. G. KREIN, *Dokl. Akad. Nauk. S.S.S.R.*, 144, 1962, p. 268-271.
[10] A. MAJDA et J. RALSTON, *Duke Math. J.*, 45, 1978, p. 183-196 et 513-536; 46, 1979, p. 725-731.
[11] M. REED et B. SIMON, *Method of Modern Mathematical Physics*, III, IV, Academic Press, 1978-1979.
[12] B. SIMON, *Trace Ideals and Their Applications*, Cambridge University Press, 1979.

Laboratoire de Mathématiques pures, associé au C.N.R.S.,
Institut Fourier, B.P. n° 116, 38402 *Saint-Martin-d'Hères Cedex.*