Matrices de diffusion pour l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique et phénomène de Aharonov-Bohm

François Nicoleau
Département de Mathématiques
U.R.A CNRS n° 758 - Université de Nantes
2, rue de la Houssinière F-44072 Nantes cedex 03
E-mail : nicoleau@math.univ-nantes.fr

1 Introduction

L'objet de cet exposé est une étude de diffusion quantique pour la paire $(H_{A,V},\ -\Delta)$, $H_{A,V}$ étant l'opérateur Hamiltonien quantique de Schrödinger décrivant l'interaction d'une particule chargée avec un champ électrique ∇V et un champ magnétique B, donné par l'opérateur différentiel sur $\mathbf{R}^n, n \geq 2$:

$$H_{A,V} = \sum_{j=1}^{n} (D_j - A_j(x))^2 + V(x) \tag{1.1}$$

où

$D_j = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}$

$A \ = \sum_{j=1}^{n} A_j \ dx_j$ est la 1-forme potentiel magnétique

$B \ = dA$ est la 2-forme champ magnétique identifiée à la matrice antisymétrique $(b_{j,k})$, $b_{j,k}(x) = \partial_{x_j} A_k(x) - \partial_{x_k} A_j(x)$, dans la base canonique de $\mathbf{R}^n$.

Cette étude est motivée par une expérience physique, dénommée *phénomène de Aharonov-Bohm*, sujet de controverse dans la physique contemporaine, ($[AH-BO]$, $[NI2]$, $[PE-TO]$). Brièvement, l'effet Aharonov-Bohm est un phénomène d'interférences dues à l'existence d'un champ magnétique, en dehors de son support : diffusion de particules chargées autour d'un solénoïde impénétrable parcouru par un courant.
Seule une approche quantique permet d'expliquer ce problème : le champ magnétique engendre un potentiel magnétique non nul en dehors du solénoïde, potentiel qui est la cause de ces interférences.
Plus précisément, à l'aide de la règle empirique de Feynmann, on peut expliquer ce phénomène comme une perturbation de phase du noyau distribution du groupe unitaire $e^{-itH_{A,V}}$:

$$e^{-itH_{A,V}} \ (x,y) \quad \sim \quad e^{i\,\omega_A(x,y)} \ e^{-itH_{0,V}} \ (x,y) \tag{1.2}$$

où $\omega_A(x,y)$ représente la circulation de la 1-forme A le long de la caractéristique reliant y au temps 0 à x au temps t, extérieure au support du champ magnétique.

2 Principaux résultats

Nous supposerons que $A, V \in C^\infty(\mathbf{R}^n)$ et vérifient les estimations de décroissance :

$$(H_1) \qquad \mid \partial_x^\alpha V(x) \mid \leq C_\alpha < x >^{-\delta-|\alpha|} \quad , \quad \delta > 0$$

$$(H_2) \qquad \mid \partial_x^\alpha A(x) \mid \leq C_\alpha < x >^{-\rho-|\alpha|} \quad , \quad \rho > 0$$

où $< x >= (1+ \mid x \mid^2)^{\frac{1}{2}}$.

En particulier, lorsque $\delta, \rho > 1$, (ie A et V à courte portée), on montre facilement que $H_{A,V}$ est une perturbation à courte portée de l'opérateur de Laplace $H_0 = -\Delta$ et que les opérateurs d'onde de Moeller

$$(2.1) \qquad W^\pm \ = \ s - \lim_{t \to \pm\infty} e^{itH_{A,V}} \ e^{-itH_0}$$

existent et sont complets.
Malheureusement, l'exemple dans $\mathbf{R^2}$ des champs magnétiques à support compact et à flux total non nul, (modèle mathématique du phénomène Aharonov-Bohm !), laisse entrevoir l'insuffisance de la remarque précedente : en vertu du théorème de Stokes, un tel champ engendre un potentiel magnétique A qui ne peut dépasser la décroissance coulombienne, $(\rho = 1)$, et donc a priori A est à longue portée.
Cependant, via une condition de jauge appropriée, sous des hypothèses assez faibles de décroissance du potentiel magnétique, on a le résultat suivant :

Théorème 1
On suppose vérifiées les hypothèses (H_1), (H_2) avec $\delta > 1$, $\rho > \frac{1}{2}$. On suppose de plus que A vérifie la condition de transversalité :

$$(H_3) \qquad A(x).x = 0 \quad , \quad \forall x \in \mathbf{R}^n.$$

Alors : les opérateurs d'onde $W^\pm$ existent et sont complets.

Ce choix de jauge fut introduit historiquement par Uhlenbeck, ($[UH]$), et détermine entièrement le potentiel A à partir du champ B :

$$(2.2) \qquad A_j(x) \ = \ \sum_{k=1}^n a_{jk}(x).x_k$$

où

$$(2.3) \qquad a_{jk}(x) \ = \ - \int_0^1 s \ b_{jk}(sx) \ ds$$

Le théorème 1 fut d'abord démontré par Perry, ($[PE]$), dans le cas particulier d'interactions magnétiques radiales, puis par Loss et Thaller dans le cas général, ($[LO-TH]$), en utilisant une méthode dépendant du temps due à Enss, ($[EN1]$).
Dans ($[NI-RO]$), nous proposons une nouvelle démonstration de ce résultat à l'aide d'une méthode stationnaire due à Isozaki et Kitada, ($[IS-KI]$). Cette approche a l'avantage de fournir des informations sur les matrices et l'amplitude de diffusion.
Enfin, signalons que très récemment, V. Enss généralisa le théorème 1 en incluant des potentiels électrostatiques à longue portée, ($[EN2]$).

Sous les hypothèses du théorème 1, on définit l'opérateur de diffusion :

$$S_A \;=\; W^{+*}\, W^{-} \tag{2.4}$$

qui se diagonalise dans la représentation spectrale de H_0 pour définir les matrices de diffusion, (opérateurs unitaires sur la sphère) :

$$S_A(\lambda) \;:\; L^2(S^{n-1}) \;\longrightarrow\; {}^2(S^{n-1}) \tag{2.5}$$

Le noyau de $S_A(\lambda)-1$, noté $T_A(\lambda)\ (\omega,\omega')$, où $\omega,\omega' \in S^{n-1}$, est appelé *amplitude de diffusion.*

En 1985, Isozaki et Kitada, ($[IS-KI]$), ont montré que, dans le cas $A \equiv 0$ et $\delta > 1$, l'amplitude de diffusion est de classe C^∞ en dehors de la diagonale et vérifie l'estimation :

$$|\ T_0(\lambda)\ (\omega,\omega')\ | \leq C\ |\ \omega-\omega'\ |^{-n+\delta_0} \tag{2.6}$$

où $\delta_0 < min\ (n,\delta)$, la constante C dépendant de δ_0.

Dans cet exposé, nous nous proposons de démontrer le résultat suivant :

Théorème 2
(i) Sous les hypothèses $(H_1)-(H_3)$ avec $\delta > 1$, $\rho > \frac{1}{2}$, l'amplitude de diffusion est de classe C^∞ en dehors de la diagonale et vérifie l' estimation :

$$|\ T_A(\lambda)\ (\omega,\omega')\ | \leq\ C\ |\ \omega-\omega'\ |^{-n+\mu_0} \tag{2.7}$$

où $\mu_0 < min\ (\delta, 2\rho, \rho+1, n)$.

(ii) En particulier, $S_A(\lambda)-1$ est un opérateur compact.

Dans le quatrième paragraphe, nous étudierons en détail le cas particulier où le champ magnétique B est à support compact, (effet Aharonov-Bohm).

3 Esquisses de démonstrations

Dans la première partie de cette section, nous allons donner une démonstration élémentaire du théorème 1, nécessaire à l'obtention d'une formule de représentation des matrices de diffusion, adaptée à notre problème.
L'idée principale de cette démonstration est analogue à celle donnée dans ($[NI-RO]$), mais en construisant une phase beaucoup plus simple, n'utilisant pas la théorie de Hamilton-Jacobi.
Pour plus de détails, on se reportera à ($[IS-KI]$), $[NI1]$, $[NI-RO]$).

3.1 Démonstration du théorème 1

Expliquons brièvement notre approche; on introduit une modification des opérateurs d'onde indépendante du temps, de la forme :

$$(3.1) \qquad W_\Phi^\pm \ = \ s - \lim_{t \to \pm\infty} \ e^{itH_{A,V}} \ J_\Phi \ e^{-itH_0} \ E_{H_0} \ (\theta, \ \infty)$$

où $\theta > 0$ et J_Φ est un opérateur Fourier intégral, (O.F.I), de phase Φ et d'amplitude 1, proche de l'identité, ([RO]).
On cherche à déterminer une phase Φ de sorte que :

$$(3.2) \qquad a(x, \partial_x \Phi(x, \xi)) - \xi^2 = O\ (< x >^{-1-\epsilon}\ ) \ \ , \ \ \epsilon > 0$$

dans des zones entrantes et sortantes de l'espace des phases, où

$$(3.3) \qquad a(x, \xi) = (\xi - A(x))^2 + V(x)$$

est le Hamiltonien classique du système.

Pour (x, ξ) dans une zone sortante, (par exemple), l'hypothèse (H_3) permet de définir :

$$(3.4) \qquad c_A(x, \xi) = - \int_0^{+\infty} A(x + t\xi).\xi \ dt \quad ,$$

circulation de la 1-forme A le long de l'orbite $t \ \to \ x + t\xi$.
Un calcul trivial nous donne :

$$(3.5) \qquad \partial_x c_A(x, \xi) = A(x) + R(x, \xi)$$

où $R(x, \xi) \ = \ O(< x >^{-\rho})$ et vérifie $R(x, \xi).\xi = 0$

On définit la phase Φ sur les états sortants par :

$$(3.6) \qquad \Phi(x, \xi) = x.\xi + c_A(x, \xi) \ \ ,$$

phase qui vérifie

$$(3.7) \qquad a(x, \partial_x \Phi^+(x, \xi)) - \xi^2 = V(x) + R^2(x, \xi) \ = \ O(< x >^{-1-\epsilon})$$

En utilisant la même méthode que ([$IS - KI$]), on obtient facilement l'existence et la complétude asymptotique pour $W_\Phi^\pm$.

Passons maintenant à la démonstration du théorème 1. Notons

$$(3.8) \qquad l_{jk}(x, \xi) = x_j \xi_k - x_k \xi_j$$

appelés *moments cinétiques.* On remarque que :

$$(3.9) \qquad c_A(x, \xi) = -\frac{1}{2} \sum_{j,k} \int_0^\infty a_{jk}(x + t\xi).l_{jk}(x, \xi) \ dt$$

et par conséquent, sur les espaces où les moments cinétiques sont bornés,

$$\Phi(x,\xi) - x.\xi = O\ (< x >^{-min\ (1,\rho)}).$$

ce qui montre que, sur de tels espaces, J_Φ est une perturbation compacte de l'identité.
On en déduit par densité :

$$W_\Phi^\pm = W^\pm E_{H_0}(\theta,\infty) \tag{3.10}$$

Pour de plus amples détails, on se reportera à ($[NI-RO]$, $[NI1]$). Le théorème 1 découle alors immédiatement de (3.10), de l'existence et de la complétude asymptotique de $W_\Phi^\pm$. □

3.2 Formule de représentation des matrices de diffusion

Nous suivons la même approche que celle de ($[IS-KI]$), avec une microlocalisation très légèrement différente, ($[NI1]$).
Rappelons brièvement de quoi il s'agit. On notera $J(d,\Phi)$ l'O.F.I de phase $\Phi(x,\xi)$, d'amplitude $d(x,\xi)$, ($[RO]$).
On cherche à déterminer deux O.F.I $J(d_{j,A},\Phi_j)$ notés par la suite $J_{j,A}$, entrelaçant $e^{-itH_{A,V}}$ et e^{-itH_0} dans de grandes régions de l'espace des phases, où Φ_j est solution de (3.2) et à support convenablement choisi. Un calcul trivial nous donne :

$$H_{A,V}J(d,\Phi) - J(d,\Phi)H_0 = J(c,\Phi) \tag{3.11}$$

où

$$\begin{aligned} c(x,\xi) = {} & [V(x) + R^2(x,\xi) - i\ divR(x,\xi)].d(x,\xi) \\ & -2i\ [\xi + R(x,\xi)].\partial_x d(x,\xi) - \Delta_x d(x,\xi) \end{aligned} \tag{3.12}$$

On cherche l'amplitude sous la forme $d(x,\xi) \sim \sum_{m=0}^{+\infty} d^m(x,\xi)$, $d^0(x,\xi) = 1$, de sorte que $c(x,\xi) \sim 0$.
On résoud pour cela les équations de transport :

$$\begin{aligned} & (\xi + R(x,\xi)).\partial_x d^m(x,\xi) - \frac{1}{2i}[V(x) + R^2(x,\xi) - i\ divR(x,\xi)].d^{m-1}(x,\xi) \\ & +\tfrac{1}{2i}\Delta_x d^{m-1}(x,\xi) = 0 \qquad \text{pour } (x,\xi) \in \Gamma^\pm. \end{aligned} \tag{3.13}$$

On obtient aisément les estimations suivantes :

$$|\ \partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta d^m(x,\xi)\ | \leq C_{\alpha\beta m} < x >^{-|\alpha| - m(\mu-1)} < \xi >^{-1} \tag{3.14}$$

où $\mu = min\ (\delta, 2\rho, 1+\rho)$.

Les amplitudes $d_{j,A}$ sont obtenues à partir des $d^m(x,\xi)$, à support dans des zones convenables.
De façon analogue à (3.10), on a :

$$W^\pm\ E_{H_0}(\theta,\infty)\ =\ s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{itH_{A,V}} J_{j,A}\ e^{-itH_0}\ E_{H_0}(\theta,\infty) \tag{3.15}$$

On déduit alors de (3.15) une formule de représentation des matrices de diffusion;
On notera pour cela :

$T_{j,A} = H_{A,V} J_{j,A} - J_{j,A} H_0$
$\Gamma_0(\lambda)$ =opérateur transformée de Fourier composé avec l'application trace sur la sphère.
$R(\lambda + i0) \ = \ s - \lim_{\epsilon \downarrow 0} (H_{A,V} - \lambda - i\epsilon)^{-1}$ donnée par le principe d'absorption limite.

On a alors la formule de représentation, ($[IS-KI]$, $[NI1]$) : $\forall \lambda \geq \sqrt{\theta}$:

$$S_A(\lambda) - 1 = B_A(\lambda) + C_A(\lambda) \tag{3.16}$$

où

$$B_A(\lambda) = -2i\pi \ \Gamma_0(\lambda) \ J^*_{1,A} \ T_{2,A} \ \Gamma^*_0(\lambda) \tag{3.17}$$

$$C_A(\lambda) = 2i\pi \ \Gamma_0(\lambda) \ T^*_{1,A} \ R(\lambda + i0) \ T_{2,A} \ \Gamma^*_0(\lambda) \tag{3.18}$$

Remarques
De la même façon que dans ($[IS-KI]$) on peut montrer que $C_A(\lambda)$ est un opérateur à noyau C^∞ sur $S^{n-1} \times S^{n-1}$.
De même, $B_A(\lambda)$ est un opérateur à noyau C^∞ en dehors de la diagonale et son noyau est donné par :

$$B_A(\lambda) \ (\omega, \omega') = \lambda^{\frac{n-2}{2}} \int_{\mathbf{R}^n} e^{-i \ [\Phi_1(x,\sqrt{\lambda}\omega) - \Phi_2(x,\sqrt{\lambda}\omega')]} \ c_{2,A}(x, \sqrt{\lambda}\omega').\overline{d_{1,A}(x, \sqrt{\lambda}\omega)} \ dx \tag{3.19}$$

où $c_{2,A}$ est donnée par (3.12) avec les notations évidentes.

Notations
Nous noterons $S_0(\lambda)$, (resp. $B_0(\lambda)$, $C_0(\lambda)$) les quantités données par (3.16), (resp. (3.17), (3.18)), dans le cas $A \equiv O$.

3.3 Comparaison des matrices de diffusion $S_A(\lambda)$ et $S_0(\lambda)$

Dans cette section, nous nous proposons de démontrer le théorème 2. L'idée de base consiste à considérer $S_A(\lambda)$ comme une perturbation de $S_0(\lambda)$. D'après la remarque de la section précédente et (2.6), il suffit d'étudier l'expression $B_A(\lambda) \ (\omega, \omega') - B_0(\lambda) \ (\omega, \omega')$, et on a :

$$| \ B_0(\lambda) \ (\omega, \omega') \ | \leq C \ \ | \ \omega - \omega' \ |^{-n+\delta_0} \tag{3.20}$$

En utilisant l'estimation (3.14) sur les fonctions $d^m(x, \xi)$, on montre l'estimation suivante :

$$B_A(\lambda) \ (\omega, \omega') \ = \ B_0(\lambda) \ (\omega, \omega') + O \ (| \ \omega - \omega' \ |^{-n+\mu_0}) \tag{3.21}$$

où $\mu_0 < min \ (\mu, n)$. Le théorème 2 en découle.□

4 Phénomène de Aharonov-Bohm

Dans cette section, nous utilisons les résultats précédents pour faire apparaitre le phénomène de Aharonov-Bohm sur l'amplitude de diffusion. Ce sujet fut récemment abordé par S.N.M. Ruijsenaars, ([RU]) dans un cas particulier : $n = 2$, $V \equiv 0$, interactions magnétiques radiales à support dans la boule $B(0, R)$.

Dans ce qui suit, nous allons préciser cela dans un cadre plus général. Nous supposerons que le champ magnétique vérifie :

$$(H_4) \qquad B \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n) \ \ \textit{et est radial}$$

On vérifie facilement que le potentiel A associé à un tel champ est à décroissance coulombienne, (i.e A vérifie (H_2) avec $\rho = 1$).

On peut montrer le résultat suivant :

Théorème 3
Sous les hypothèses (H_1), (H_3), (H_4) avec $\delta > 1$, pour (ω, ω') proche de la diagonale,

$$(4.1) \qquad T_A(\lambda)\ (\omega, \omega') \ = \ e^{-i\ \Phi_B(\omega,\omega')}\ T_0(\lambda)\ (\omega, \omega')$$

où $\Phi_B(\omega, \omega')$ représente le flux du champ magnétique à travers le secteur angulaire $(0, \omega, \omega')$.

On en déduit aisément :

Corollaire 4
Sous les hypothèses du théorème 3,
(i) en dimension $n = 2$:

$$(4.2) \qquad T_A(\lambda)\ (\omega, \omega') \ = \ e^{-i\Phi \frac{P(\omega-\omega')}{2\pi}}\ T_0(\lambda)\ (\omega, \omega')$$

où Φ = flux total du champ magnétique et où l'on a identifié S^1 à $(-\pi, \pi)$, $P(.)$ étant la détermination principale de l'angle.
(ii) en dimension $n \geq 3$:

$$(4.3) \qquad T_A(\lambda)\ (\omega, \omega') \ = T_0(\lambda)\ (\omega, \omega')$$

Remarques
Le corollaire 4 montre donc que l'effet Aharonov-Bohm est indécelable sur l'amplitude de diffusion, dans un voisinage de la diagonale, en dimension $n \geq 3$.
Par contre, en dimension 2, il apparait comme une perturbation de phase de $T_0(\lambda)\ (\omega, \omega')$, résultat obtenu par S.N.M Ruisjenaars, ([RU]).

References

[AH-BO] Y.Aharonov - D.Bohm : *Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory*, The physical review, second series Vol. 115, $n°3$, (1959).

[EN1] V.Enss : *Long-range scattering of two-and-three body quantum systems*, Actes des journées équations aux dérivées partielles, Saint Jean de Monts, pp. 1-31, (1989).

[EN2] V.Enss : *Quantum scattering with long-range magnetic fields*, To appear in the Birkhaüser Series Operator Theory, advances and applications.

[IS-KI] H.Isozaki - H.Kitada : *Scattering matrices for two-body Schrödinger operators*, The University of Tokyo, Vol. 35, $n°2$, pp. 81-107, (1985).

[LO-TH] M.Loss - B.Thaller : *Scattering of particles by long-range magnetic fields*, Annals of physics 176, pp. 159-180, (1987).

[NI1] F.Nicoleau : *Matrices de diffusion pour l'opérateur de Schrödinger en présence d'un champ magnétique - Phénomène de Aharonov-Bohm*, Preprint Université de Nantes,(1993).

[NI2] F.Nicoleau : *Approximation semi-classique du propagateur d'un système électromagnétique et phénomène de Aharonov-Bohm*, Helv.Phys. Acta., Vol. 65, pp. 722-747, (1992).

[NI-RO] F.Nicoleau - D.Robert : *Théorie de la diffusion quantique pour des perturbations à longue et courte portée du champ magnétique*, Annales de la faculté de Toulouse, Vol. XII $n°2$, pp. 185-194, (1991).

[PE] P.A.Perry : *Scattering theory by the Enss method*, Mathematical Reports Series, Vol. 1 part. 1, Harwood Acad. Publishers, (1983).

[PE-TO] M.Peshkin - A.Tonomura : *The Aharonov-Bohm effect*, Lectures notes in Physics, Springer-Verlag, (1989).

[RO] D.Robert : *Autour de l'approximation semi-classique*, Progress in Mathematics, Vol. 68, Birkhaüser, Basel, (1987).

[RU] S.N.M.Ruijsenaars : *The Aharonov-Bohm effect and scattering theory*, Annals of Physics 146, pp. 1-34, (1983).

[UH] K.H.Uhlenbeck : *Removable singularities in Yang-Mills fields*, Commun. Math. Phys. 83, pp. 11-29, (1982).