Sujet de thèse :

Théorie de la diffusion pour des modèles dissipatifs en mécanique quantique

Proposé par Jérémy Faupin
Pr. à l'Institut Elie Cartan, Université de Lorraine, Metz

Mots-clés : Physique Mathématique, Théorie spectrale, Mécanique quantique, Théorie de la diffusion, Opérateurs non auto-adjoints.

1. Position du problème

D'une manière générale, lorsqu'un système quantique donné S interagit avec un autre système quantique S', une partie de l'énergie de S peut, éventuellement, être transférée vers S' de manière irréversible. Ce phénomène de perte irréversible d'énergie pour le système S est généralement appelé dissipation quantique. En particulier, fondamentalement, aucun système quantique n'est complètement isolé de son environnement et l'énergie de tout système quantique est susceptible de subir une forme de dissipation.

L'objet principal de cette thèse consistera en l'étude mathématique rigoureuse d'un modèle physique effectif de la dissipation quantique. Plus précisément, la classe de modèles considérée est décrite par une famille d'opérateurs *non auto-adjoints* – des opérateurs *dissipatifs* – agissant dans un espace de Hilbert correspondant aux états quantiques du système physique étudié. L'opérateur dissipatif engendre un semi-groupe de contractions ; l'équation de Schrödinger associée à ce semi-groupe représente la dynamique du système. Nous décrivons plus précisément ci-dessous le modèle mathématique, l'équation de Schrödinger associée à ce modèle, et l'interprétation physique qui en découle. Précisons néanmoins dès maintenant que ce type de modèle permet d'étudier de nombreuses situations physiques où une forme de dissipation quantique entre en jeu. En particulier, un tel modèle est utilisé de manière intensive en physique nucléaire, depuis plusieurs décennies, pour étudier par exemple l'absorption ou la diffusion – *scattering* – d'un neutron par le noyau d'un atome complexe.

Pour fixer les idées, considérons donc pour commencer un neutron projeté sur le noyau d'un atome complexe (par exemple un noyau d'uranium ; pour la réalisation concrète d'une expérience en laboratoire, bien sûr, un grand nombre de neutrons sont projetés sur un grand nombre de noyaux d'uranium). Après avoir interagi avec le noyau, le neutron peut ou bien « rebondir » dans une autre direction, ou bien être absorbé par le noyau. Dans le premier cas, on parle de diffusion élastique, dans le second cas on parle de capture. Un noyau capturant un neutron est parfois appelé *noyau intermédiaire* – *compound nucleus* – et peut ensuite donner lieu, par exemple, à une fission nucléaire.

Le concept de noyau intermédiaire a été introduit par Niels Bohr [Bo] en 1936. En 1954, Feshbach, Porter et Weisskopf [FPW] ont proposé un modèle représentant l'interaction d'un neutron avec un noyau et permettant de décrire à la fois la diffusion élastique et la formation d'un noyau intermédiaire. Dans le modèle de Feshbach, Porter et Weisskopf, la force exercée par le noyau sur le neutron est associée à un potentiel complexe empirique de la forme $V - iW$, où V et W sont des potentiels à valeurs réelles (des fonctions de R^3 dans R) et W est positif. De plus, V et W sont supposés être à supports compacts, ou au moins décroître suffisamment vite à l'infini, ce qui correspond à l'hypothèse physique que le noyau est localisé dans l'espace. Le *pseudo-hamiltonien* pour le neutron est alors un opérateur agissant dans $L^2(R^3)$ et donné par

$$H = -\Delta + V - iW,$$

où Δ désigne le Laplacien. On parle ici de pseudo-hamiltonien car H n'est pas un opérateur auto-adjoint, seulement un opérateur dissipatif.

Le pseudo-hamiltonien de Feshbach, Porter et Weisskopf étant un opérateur dissipatif, il est bien connu que $-iH$ est le générateur d'un semi-groupe de contractions dans $L^2(R^3)$, noté e^{-itH}, $t \geq 0$. En particulier, pour tout état quantique initial du neutron $u_0 \in L^2(R^3)$ tel que $||u_0|| = 1$, la fonction $t \to ||\ e^{-itH}u_0\ ||$ est décroissante sur l'intervalle $[0,+\infty[$, et la quantité

$$P_{abs} = 1 - \lim ||\ e^{-itH}\ u_0\ ||^2, \ \ t \to +\infty,$$

est interprétée comme la probabilité d'absorption du neutron par le noyau (ou autrement dit la probabilité de formation d'un noyau intermédiaire). De la même manière, la quantité

$$P_{scatt} = \lim ||\ e^{-itH}\ u_0\ ||^2, \ \ t \to +\infty,$$

est interprétée comme la probabilité que le neutron, initialement dans l'état u_0, soit diffusé de manière élastique. Dans le cas où cette dernière probabilité est strictement positive, on s'attend à ce qu'il existe un état de diffusion $u_+ \in L^2(R^3)$ tel que $||u_+||^2 = P_{scatt}$ et

$$||\ e^{-itH}\ u_0 - e^{it\Delta}\ u_+\ || \to 0, \ \ t \to +\infty.$$

Ce modèle de Feshbach, Porter et Weisskopf est parfois appelé modèle optique nucléaire – *nuclear optical model* –, le qualificatif « optique » étant utilisé en référence au phénomène d'absorption et de réfraction de la lumière. Le modèle est empirique dans le sens où la forme précise des potentiels V et W est déterminée par les résultats de l'expérience : on teste différents potentiels de manière à pouvoir reproduire le plus précisément possible par le calcul les résultats de l'expérience. Généralement V et W sont décomposés en une somme de termes qui correspondent à la forme attendue des potentiels dans différentes régions de l'espace ; d'autres termes sont également parfois inclus, des termes d'interaction spin-orbite, ou encore des termes dépendant de l'impulsion du neutron (en plus de sa position). Voir par exemple [Ho] ou [Fe] pour une description détaillée des modèles considérés dans la littérature physique.

Physiquement, la limite

$$||\ e^{-itH}\ u_0 - e^{it\Delta}\ u_+\ || \to 0, \ \ t \to +\infty,$$

signifie que l'état du neutron au temps t, $e^{-itH}\ u_0$, se comporte, asymptotiquement pour des temps très grands, comme si le noyau n'était pas là (le neutron est propagé à l'infini et l'interaction avec le noyau devient négligeable). Mathématiquement, cela revient à dire que la solution de l'équation de Schrödinger associée à H, avec condition initiale u_0, est arbitrairement proche lorsque $t \to +\infty$, pour la norme de $L^2(R^3)$, de la solution de l'équation de Schrödinger associée au Laplacien libre $-\Delta$ avec condition initiale u_+. Ce type de propriété asymptotique est fréquemment étudié dans le domaine des équations aux dérivées partielles et porte le nom, selon les situations, de « *scattering* » ou de *complétude asymptotique faible*. Il s'agit en général de l'un des points clés que l'on cherche à démontrer si l'on souhaite obtenir une *théorie de la diffusion* convenable pour le modèle considéré.

En utilisant le fait que $e^{it\Delta}$ est unitaire pour tout t, il est facile de voir que la propriété de complétude asymptotique faible est équivalente à l'existence de l'*opérateur d'onde* appliqué à l'état initial u_0,

$$W_+(-\Delta,H)\, u_0 = \lim e^{-it\Delta}\, e^{-itH}\, u_0, \quad t \to +\infty.$$

La théorie de la diffusion peut être comprise comme l'étude de l'existence et des propriétés de l'opérateur $W_+(-\Delta,H)$, ainsi que de l'opérateur d'onde entrant $W_-(H, -\Delta)$. Celui-ci est défini de la même manière que dans la théorie de la diffusion unitaire, c'est-à-dire

$$W_-(H, -\Delta) = \text{s-lim}\, e^{-itH}\, e^{-it\Delta}, \quad t \to +\infty,$$

où s-lim signifie limite forte. La composition de $W_+(-\Delta,H)$ et $W_-(H,-\Delta)$, si elle est bien définie, permet d'introduire l'*opérateur de scattering*. La propriété de *complétude asymptotique* pour $W_-(H,-\Delta)$ correspond à l'égalité

$$\mathrm{Ran}(W_-(H,-\Delta)) = H_{pp}(H^*)^{\perp}$$

où $H_{pp}(H^*)$ est l'espace vectoriel engendré par tous les vecteurs propres généralisés de H^*.

Dans le cas d'équations aux dérivées partielles linéaires, et lorsque H est auto-adjoint, la théorie de la diffusion a été très étudiée depuis les années 60. Elle est maintenant comprise sous une grande diversité d'hypothèses (voir par exemple les livres [RS], [Ya], [DG]). Dans le cas qui nous intéresse, la situation est toutefois nettement plus compliquée dans la mesure où H n'est pas auto-adjoint, si bien qu'au lieu de comparer deux groupes unitaires e^{-itH} et $e^{it\Delta}$, on doit comparer un semi-groupe de contractions avec un groupe unitaire. Par ailleurs, le calcul fonctionnel, qui est un outil central dans le cas de la théorie de la diffusion pour les opérateurs auto-adjoints, n'est pas disponible dans le cas dissipatif, au moins en ce qui concerne le théorème spectral habituel.

Comme l'expression explicite des potentiels V et W repose sur les données d'une expérience particulière et est donc amenée à évoluer, il est souhaitable de pouvoir construire une théorie de la diffusion pour une classe d'opérateurs abstraits. Bien sûr la classe d'opérateurs abstraits doit contenir comme cas particuliers les opérateurs de Schrödinger dissipatifs $H = -\Delta + V - iW$ associés au modèle optique nucléaire. On est donc naturellement amené à considérer des opérateurs de la forme

$$H = H_0 + V - iC^*C,$$

où H_0 est un opérateur auto-adjoint généralisant le Laplacien $-\Delta$, V est un opérateur symétrique et C un opérateur a priori quelconque. L'un des objectifs principaux de la thèse sera de déterminer des hypothèses abstraites générales permettant de définir une théorie de la diffusion pour H satisfaisant les principales propriétés fondamentales escomptées pour une telle théorie, notamment la propriété de complétude asymptotique. Bien entendu, les conditions abstraites devront être formulées de telle façon qu'il soit possible de vérifier qu'elles sont en effet satisfaites dans le cas particulier où $H = -\Delta + V - iW$, les potentiels V et W étant soumis à des conditions raisonnables.

La théorie de la diffusion pour des opérateurs dissipatifs dans des espaces de Hilbert a été considérée par différents auteurs, essentiellement depuis la fin des années 70. On peut notamment mentionner des études mathématiques concernant une version abstraite d'un modèle optique nucléaire dans des articles de Martin [Ma], Davies [Da1, Da2] et Neidhardt [Ne]. Dans le cas des opérateurs de Schrödinger, Mochizuki [Mo] et Simon [So] ont obtenu des résultats importants, et sous une hypothèse de « faible couplage » (V et W opérateurs bornés de normes suffisamment petites), la théorie est bien développée, voir par exemple Kato [Ka], et les articles récents [WZ] et [FFFS]. Ces références établissent l'existence des opérateurs d'ondes sous diverses hypothèses. En revanche, en dehors des cas de faible couplage, la propriété de complétude asymptotique est beaucoup plus difficile à démontrer.

Dans la pré-publication [FF], la théorie de la diffusion pour des opérateurs de la forme $H = H_0 + V - iC^*C$ agissant dans un espace de Hilbert est étudiée, en supposant que H_0 est un opérateur auto-adjoint avec spectre absolument continu, V est un opérateur symétrique relativement compact par rapport à H_0 et C est un opérateur borné et relativement compact par rapport à H_0. En supposant de plus que C est *relativement lisse*, au sens de Kato, par rapport à $H_0 + V$, et que H n'a pas de *singularités spectrales* sur l'axe réel, la propriété de complétude asymptotique est démontrée. Notons que les de [FF] hypothèses sont vérifiées dans le cas particulier d'opérateurs de Schrödinger $H = -\Delta + V - iW$ si V et W sont bornés et à support compacts. En particulier, dans ce cas, une singularité spectrale correspond à une *résonance réelle*, dans le sens habituel (voir par exemple [DZ]).

Un des buts de la thèse sera d'améliorer et de généraliser les résultats existant en théorie de la diffusion dissipative, notamment ceux obtenus dans [FF], dans plusieurs directions physiquement et mathématiquement pertinentes.

2. <u>Objectifs</u>

<u>Première partie de la thèse</u>

Dans un premier temps, on considérera des opérateurs dissipatifs de la forme $H = H_0 + V - iC^*C$ en assouplissant l'hypothèse considérée dans [FF] qui impose à C d'être borné. Le fait de pouvoir considérer des opérateurs C non bornés ne constitue pas simplement une amélioration technique. Par exemple, si V et C ne sont pas bornés, le semi-groupe inverse e^{itH} (pour t positif) n'est pas nécessairement bien défini ce qui pourrait, dans des cas pathologiques (mais potentiellement intéressants), entraîner l'absence de complétude asymptotique. Néanmoins, en ajustant des hypothèses, il semble probable que l'on puisse généraliser certains résultats de [FF] au cas d'opérateurs C non bornés. Une des principales difficultés consistera à gérer les différentes questions de domaines d'opérateurs entrant en jeu pour pouvoir justifier chacune des étapes de la preuve. On commencera par des hypothèses relativement contraignantes sur V et C, puis on essaiera de les affaiblir par étapes jusqu'à l'obtention de conditions les plus générales possible. On pourra également s'attaquer à l'étude de cas pathologiques, au moins dans un cas concret.

Comme dans [Da1] ou [FF], le principal exemple auquel devra s'appliquer la théorie abstraite développée dans la thèse sera un opérateur de Schrödinger de la forme $H = -\Delta + V - iW$. Les hypothèses formulées dans la thèse devront donc couvrir le cas de potentiels V et W non bornés (contrairement aux hypothèses de [FF]). De plus, une autre amélioration, cruciale pour les applications qui apparaissent dans la littérature physique, devra être de considérer des opérateurs V et W qui ne sont pas simplement des opérateurs de multiplication (par exemple des opérateurs pseudo-différentiels ou encore des opérateurs matriciels modélisant une interaction spin-orbite, pas nécessairement des potentiels). Une revue précise et détaillée de la littérature sur des effets régularisant pour des opérateurs de type Schrödinger généralisés sera nécessaire pour cette étape (voir un exemple dans [BK]).

Un point clé sera de comprendre le comportement des singularités spectrales (résonances réelles, voir par exemple [DZ]) dans ce cas dissipatif avec opérateurs non bornés. On s'appuiera sur des travaux récents qui devraient pouvoir être adaptés au cas qui nous intéresse, au moins en imposant de bonnes conditions sur les potentiels.

Deuxième partie de la thèse

Dans une deuxième partie, on considérera un modèle dissipatif dépendant du temps, c'est-à-dire que les opérateurs effectifs V(t) et C(t) apparaissant dans le pseudo-hamiltonien $H = H_0 + V(t) - iC(t)^*C(t)$ pourront dépendre du paramètre temporel t. Il s'agit là aussi d'un cas physique pertinent, utilisé notamment en physique nucléaire, et qui ne semble pas avoir été considéré dans la littérature mathématique jusqu'à maintenant, au moins pour ce qui concerne les résultats du type de ceux obtenus dans la première partie.

Mathématiquement, la situation est plus compliquée que dans le cas précédent dans la mesure où le semi-groupe de contractions e^{-itH} décrivant la dynamique du système est remplacé par un propagateur. Toutefois, au moins dans le cas où V(t) et C(t) sont des fonctions bornées de t décroissant suffisamment vite à l'infini, l'existence des opérateurs d'onde devrait être accessible sans obstacle majeur. Si aucune difficulté n'apparaît, on envisagera alors le cas plus délicat de potentiels à décroissance temporelle lente. De toute façon, que la décroissance en temps soit rapide ou lente, un des points principaux pour cette partie consistera à comprendre ce que devient, dans le cas dépendant du temps, la propriété de complétude asymptotique établie dans le cas stationnaire.

Plusieurs études mathématiques de modèles dissipatifs dépendant du temps existent. On pourra par exemple se référer au livre [Pe]. On essaiera alors de combiner ces études avec la théorie du scattering unitaire qui existe pour les modèles dépendant du temps (voir par exemple [DG]). Il pourra être intéressant ici de considérer, en plus des opérateurs d'onde, les opérateurs de position ou de vitesse asymptotique dont il s'agira déjà d'établir l'existence.

Fin de la thèse

En fonction du temps restant, on pourra s'intéresser à de possibles extensions ou applications pertinentes des résultats obtenus dans les deux premières parties. Sans entrer dans les détails, on peut mentionner par exemple l'étude de modèles non dissipatifs (avec des applications potentielles dans le domaine des équations aux dérivées partielles non linéaires, voir par exemple [Sc]), ou encore la théorie de la diffusion pour des équations de Lindblad (voir par exemple [Al,Da3,FFFS]).

Références

[Al] R. Alicki. *On the scattering theory for quantum dynamical semigroups*. Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A (N.S.), **35**(2), (1981), 97–103.
[Bo] N. Bohr. *Neutron capture and nuclear constitution*. Nature, **137**, (1936), 344–348.
[BK] M. Ben-Artzi and S. Klainerman. *Decay and regularity for the Schrödinger equation*. J. Anal. Math., **58**, (1992), 25–37.
[Da1] E. B. Davies. *Two-channel Hamiltonians and the optical model of nuclear scattering.* Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A (N.S.), **29**(4), (1979), 395–413.
[Da2] E. B. Davies. *Nonunitary scattering and capture. I. Hilbert space theory*. Comm. Math. Phys., **71**(3), (1980), 277–288.

[Da3] E. B. Davies. *Nonunitary scattering and capture. II. Quantum dynamical semigroup theory*. Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A (N.S.), **32**(4), (1980), 361–375.
[DG] J. Derezinski and C. Gérard, *Scattering Theory of Classical and Quantum N-Particle Systems*, Text and Monographs in Physics, Springer Verlag, (1997).
[DS] N. Dunford and J. T. Schwartz. *Linear operators. Part III: Spectral operators.* Interscience Publishers [John Wiley & Sons, Inc.], New York-London-Sydney, 1971. With the assistance of William G. Bade and Robert G. Bartle, Pure and Applied Mathematics, Vol. VII.
[DZ] S. Dyatlov and M. Zworski. *Mathematical theory of scattering resonances*. In preparation.
[FFFS] M. Falconi, J. Faupin, J. Fröhlich, and B. Schubnel. *Scattering Theory for Lindblad Master Equations*. Comm. Math. Phys., **350**(3), (2017), 1185–1218.
[FF] J. Faupin and J. Fröhlich, *Asymptotic Completeness in dissipative scattering theory*, arXiv:1703.09018.
[Fe] H. Feshbach. *Theoretical Nuclear Physics, Nuclear Reactions*. Wiley, New York, (1992).
[FPW] H. Feshbach, C. Porter, and V. Weisskopf. *Model for nuclear reactions with neutrons*. Phys. Rev., **96**, (1954), 448–464.
[Ho] P. E. Hodgson. *The nuclear optical model*. Rep. Prog. Phys., 34(2):765–819, (1971).
[Ka1] M. Kadowaki, *Resolvent estimates and scattering states for dissipative systems*., Publ. Res. Inst. Math. Sci., 38(1):191-209, (2002).
[Ka2] M. Kadowaki. *On a framework of scattering for dissipative systems,* Osaka J. Math., 40(1):245-270, (2003).
[Ka] T. Kato. *Wave operators and similarity for some non-selfadjoint operators*. Math. Ann., 162, (1966), 258–279.
[Ma] P. A. Martin. *Scattering theory with dissipative interactions and time delay*. Nuovo Cimento B (11), **30**(2), (1975), 217–238.
[Mo] K. Mochizuki. *Eigenfunction expansions associated with the Schrödinger operator with a complex potential and the scattering theory*. Publ. Res. Inst. Math. Sci. Ser. A, **4**, (1968), 419–466.
[Ne] H. Neidhardt. *A nuclear dissipative scattering theory*. J. Operator Theory, **14**(1), (1985), 57–66.
[Pe] V. Petkov. *Scattering theory for hyperbolic operators*, volume 21 of Studies in Mathematics and its Applications. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, (1989).
[RS] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. III. Scattering theory*. Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich, Publishers], New York-London, (1979).
[Sc] W. Schlag, *Stable manifolds for an orbitally unstable nonlinear Schrödinger equation*, Ann. of Math., **169**, 139-227, (2009).
[Si] B. Simon. *Phase space analysis of simple scattering systems: extensions of some work of Enss*. Duke Math. J., **46**(1), (1979), 119–168.
[WZ] X. P. Wang and L. Zhu. *On the wave operator for dissipative potentials with small imaginary part*. Asymptot. Anal., **86**(1), (2014), 49–57.
[Ya] D. R. Yafaev. *Mathematical scattering theory*, volume 105 of Translations of Mathematical Monographs. American Mathematical Society, Providence, RI, 1992. General theory, Translated from the Russian by J. R. Schulenberger

Jérémy Faupin