Mémoire de première année

Limite cinétique du modèle d'Anderson

Adèle DEBERGE, Alexandre BERTOLINO

Mai 2022

Résumé

Dans ce mémoire on étudie la dynamique d'une particule chargée dans un cristal à défauts aléatoires évoluant selon l'équation de Schrödinger. Notre objectif a été de voir émerger l'équation de collision de Boltzmann depuis les équations de la mécanique quantique. Après avoir posé le cadre physique du problème, nous donnons les outils d'analyse fonctionelle que nous utilisons pour résoudre les équations. On utilisera une méthode perturbative. La majeure partie de notre travail consiste en le contrôle de la série perturbative obtenue. Enfin, en utilisant les premiers termes de cette série on voit émerger la dynamique de l'équation de Boltzmann au premier ordre.

Table des matières

1 Introduction physique

1.1 Mécanique quantique, équation de Schrödinger

Soit un électron. En physique quantique, son état ne peut pas être déterminé avec exactitude à tout instant. On ne peut plus le repérer par une position exacte $x \in \mathbb{R}^d$, on étudie plutôt sa densité de probabilité de présence : son état est représenté par une *fonction d'onde* $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ à valeurs complexes. On suppose

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Ainsi, $|\psi(x)|^2$ est une densité de probabilité, c'est celle de la loi de la position de l'électron. D'après l'égalité de Parseval, le carré de la transformée de Fourier de ψ est également une densité de probabilité : $|\hat{\psi}(v)|^2$ est la densité de la loi de la vitesse de l'électron.

Afin de pouvoir prédire l'évolution au cours du temps t de l'électron dans son environnement, il faut une équation dynamique pour ψ, c'est l'équation de Schrödinger :

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

où H est un opérateur hermitien appelé le *hamiltonien* du système. Il représente l'énergie du système. Le plus souvent il se décompose en un terme d'énergie cinétique et un terme d'énergie potentielle :

$$H\psi(x) = -(\Delta\psi)(x) + V(x)\psi(x)$$

où δ est le laplacien et $V : R^d \to R$ le potentiel.

Notre objectif, l'équation de Boltzmann, décrit, dans un cristal métallique, l'évolution de la densité dans l'espace des phases $\rho(x, v)$ (son interprétation statistique correspond au nombre d'électrons libres en x, de vitesse v). Mais à cause de l'impossibilité quantique de déterminer simultanément vitesse et position (principe d'incertitude de Heisenberg), la définition classique de cette quantité ne convient pas à un problème quantique. Pour cette raison les physiciens ont introduit la *transformée de Wigner* :

$$W_\psi(x, v) = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{\psi}(x + \frac{z}{2})\psi(x - \frac{z}{2})dz$$

Ce qui distingue W_ψ de la densité habituelle dans l'espace des phases est qu'elle est à valeurs réelles mais peut être négative. Cependant, ses marginales reconstruisent bien les densités de position et de vitesse :

$$\int_{\mathbb{R}^d} W_\psi(x, v)dx = |\hat{\psi}(v)|^2, \qquad \int_{\mathbb{R}^d} W_\psi(x, v)dv = |\psi(x)|^2$$

En physique quantique, on mesure des observables. Nous les représenterons ici par des fonctions $J \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. Pour un électron de fonction d'onde ψ, l'espérance du résultat d'une mesure de la grandeur J est sa valeur moyenne contre la mesure $W_\psi(x, v)dxdv$, c'est la quantité

$$\langle J, W_\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} J(x, v)W_\psi(x, v)dxdv$$

Par exemple, J peut être l'observable "position" $J(x, v) = x$ et $\langle J, W_\psi \rangle$ donne dans ce cas la position de la particule.

1.2 Potentiel engendré par un cristal

La situation est la suivante : un électron se déplace dans un cristal, c'est à dire un réseau d'atomes placés sur $\mathbb{Z}^d$, chacun donnant lieu à un potentiel G. Par superposition, le potentiel total est

$$V(x) = \sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} G(x - \alpha)$$

Pour simplifier les calculs, on effectuera l'hypothèse que G est dans l'espace de Schwartz. Le cristal présente en réalité des défauts aléatoires. On modélise cela en ajoutant un facteur aléatoire v_α devant le potentiel créé par chaque site. On note $V_\alpha(x) = v_\alpha G(x - \alpha)$. On suppose que les v_α sont i.i.d., à support borné avec $\mathbb{E}(v_\alpha) = 0$ et $\mathbb{E}(v_\alpha^2) = 1$.

Remarques : G étant de Schwartz et les v_α étant à support borné, $V = \sum_\alpha V_\alpha$ est défini presque sûrement, continu presque sûrement et borné presque sûrement.

Lemme 1.1. *Presque sûrement, la série $\sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} v_\alpha G(x - \alpha)$ converge normalement sur tout compact.*

Preuve. *Pour tout $\alpha \in \mathbb{Z}^d$, v_α est borné presque sûrement et les v_α sont de même loi. Choisissons $M > 0$ tel que $\forall \alpha \in \mathbb{Z}^d, \mathbb{P}(|v_\alpha| < M) = 1$. $A := \cap(|v_\alpha| < M)$ est alors presque sûr comme intersection dénombrable d'événements presque sûrs. G est de Schwartz : choisissons $C > 0$ tel que $\forall x \in \mathbb{R}^d, |G(x)| < \frac{C}{(1+|x|)^{2d}}$. Soit K compact de $\mathbb{R}^d$. Choisissons $R > 0$ tel que $K \subset B[0, R]$. Pour tout x dans K pour tout α de norme supérieure à R, $0 \leq |\alpha| - R \leq |\alpha| - |x| \leq |x - \alpha|$ donc $|G(x - \alpha)| < \frac{C}{(1+|\alpha|-R)^{2d}}$ et alors $v_\alpha |G(x - \alpha)| < \frac{C\ M}{(1+|\alpha|-R)^{2d}}$ (p.s.). Cette domination donne la convergence normale sur K (p.s.).*

Proposition 1.1 (Hypothèse de sommabilité du potentiel)**.** *Au sens des distributions,*

$$\sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} \mathbb{E}[\widehat{V_\alpha}(p) \overline{\widehat{V_\alpha}(p')}_\alpha] = |\widehat{G}(p)|^2 \delta(p - p')$$

Preuve. *$\mathcal{F}[x \mapsto G(x - \alpha)](p) = \widehat{G}(p) e^{-ip\alpha}$ donc $\widehat{V_\alpha}(p)\overline{\widehat{V_\alpha}(p')} = v_\alpha \overline{v_\alpha} \widehat{G}(p) \widehat{G}(p) e^{i(p'-p)\alpha}$. En prenant l'espérance, on a donc $\mathbb{E}[\widehat{V_\alpha}(p)\overline{\widehat{V_\alpha}(p')}] = \widehat{G}(p) e^{i(p'-p)\alpha}$.*
Donc $\sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} \mathbb{E}[\widehat{V_\alpha}(p)\overline{\widehat{V_\alpha}(p')}_\alpha] = \widehat{G}(p) \sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} e^{i(p'-p)\alpha}$ (au sens des distributions). Or avec la formule sommatoire de Poisson,

$$\sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} e^{i(p'-p)\alpha} = \mathcal{F}[\sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} \delta_\alpha(p' - p)] = \sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} \delta_\alpha(p' - p)$$

$\widehat{G}$ ayant son support dans $B(0, 1)$, on en déduit la formule.

1.3 Equation de collision de Boltzmann

Soient N particules classiques, modélisées par des sphères dures. La densité $\rho(t, x, v)$ est définie par le fait que, à l'instant t, le nombre de particules dans le volume dx, de vitesse comprise dans le volume dv est $dN = \rho(t, x, v) dx dv$. La physique statistique nous apprend que ρ évolue selon l'équation de collision de Boltzmann :

$$\partial_t \rho(t, x, v) + (v \cdot \nabla_x) \rho(t, x, v) = \int_{\mathbb{R}^d} (\rho(t, x, u) - \rho(t, x, v)) \sigma(u, v) du$$

A gauche on trouve la dérivée particulaire de ρ, et à droite le terme de déflection de la quantité de mouvement due aux collisions.

Dans le problème qui nous intéresse, on suppose que les électrons n'interagissent pas, de telle sorte qu'il n'y ait à étudier que le mouvement d'un seul électron. La densité ρ est alors remplacée par la transformée de Wigner W_ψ de la fonction d'onde de l'électron. Les électrons évoluant dans un milieu aléatoire, on souhaite obtenir une équation d'évolution qui porte sur l'éspérance de la transformée de Wigner.

Celle-ci apparaît dans la limite où le potentiel aléatoire est suffisament petit et lorsque la bonne échelle est choisie. Plus précisément, si on note ϵV le potentiel, avec $\epsilon > 0$ caractérisant sa petitesse, on considère la limite cinétique du modèle, c'est à dire la limite suivante :

$$\lim_{e \to 0} W_{\psi_{t/\epsilon^2}}(x/\epsilon^2, v) = \tilde{W}_t(x, v)$$

.

Théorème 1.1. *Soit $d \geq 2$, $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$. On note ψ_t la fonction d'onde obtenue par évolution de ψ_0 d'après l'équation de Schrödinger dans le potentiel aléatoire pendant un temps t. Alors dans la limite cinétique l'espérance de la tranformée de Wigner converge faiblement : si $W_t^\epsilon(x, v) = W_{\psi_{t/\epsilon^2}}(x/\epsilon^2, v)$,*

$$\mathbb{E}[W_t^\epsilon(x, v)] \to \tilde{W}_t(x, v)$$

(la limite est faible et pour $\epsilon \to 0$) De plus, $\tilde{W}$ vérifie l'équation de Boltzmann :

$$\partial_t \tilde{W}_t(x, v) + (v \cdot \nabla_x)\tilde{W}_t(x, v) = \int_{\mathbb{R}^d} (\tilde{W}_t(x, u) - \tilde{W}_t(x, v))\sigma(u, v) du$$

Le noyau de collision $\sigma(u, v)$ étant donné par

$$\sigma(u, v) = |\hat{G}(u - v)|^2 \delta\left(\frac{u^2 - v^2}{2}\right)$$

La convergence vers $\tilde{W}$ est faible, c'est pour cela que nous nous intéressons aux quantités $\langle J, W_\psi \rangle$. Par densité dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, il suffit de considérer le cas où J est de Schwartz. Nous verrons par un argument de densité légérement plus élaboré qu'on peut faire de même avec ψ_0.

2 Outils pour la résolution de l'équation de Schrödinger

On s'intéresse ici à la résolution de l'équation de Schrödinger déterministe dans deux cas.

Dans le cadre de ce mémoire, on supposera souvent que les fonctions manipulées sont très régulières (typiquement qu'elles sont de Schwartz).

Pour résoudre une EDP, on se place généralement dans un espace de Sobolev, où les objets sont beaucoup moins réguliers. Pour l'équation de Schrödinger, on cherche une solution ψ dans $C(\mathbb{R}, (H^2(\mathbb{R}^d), ||.||_{H^2})))$ admettant une dérivée pour la topologie associée à $||.||_2$, cette dérivée étant continue pour la norme L^2 (on notera alors $\psi \in C^1(\mathbb{R}, H^2(\mathbb{R}^d)))$. Dans les articles étudiés au cours du mémoire, on trouve de nombreuses formules faisant intervenir, par exemple l'intégrale de ce genre de fonctions, ou bien leur transformée de Fourier, ce qui n'a pas été vu dans le cadre des cours. On explique ici quelques uns de ces outils et voit comment ils étendent des notions existant pour des objets réguliers.

2.1 Intégrale de Böchner

L'espace $L^2(\mathbb{R}^d)$ est un espace de Banach. Sur ce genre d'espace, on peut définir une notion d'intégration.

Comme dans le cadre de l'intégration de Lebesgue on définit d'abord l'intégrale pour des fonctions en escalier.

Définition 2.1. *Soit (X,$\mathcal{T}$,μ) un espace mesuré et (E,|.|) un espace de Banach. Une fonction f de X dans E est en escalier lorsqu'il existe $A_k \in \mathcal{T}$ et $x_k \in E$ tels que $f = \sum_{k=1}^{n} x_k \mathbb{1}_{A_k}$. L'ensemble des fonctions en escalier est un espace vectoriel.*

On définit alors $\int_X f := \sum_k x_k \mu(A_k)$. On vérifie aisément que cette définition ne dépend pas du choix des A_k et x_k. Les propositions suivantes sont immédiates.

Proposition 2.1. *Soit f fonction en escalier.*

1. *(Inégalité triangulaire)* $|\int_X f| \leq \int_X |f|$
2. *L'intégration est linéaire sur l'ensemble des fonctions en escalier.*
3. *L'intégration commute avec les opérateurs linéaires.*
4. *Si Φ est une forme linéaire sur E, alors $\Phi(\int_X f) = \int_X \Phi \circ f$*

On définit ensuite la notion de mesurabilité puis celle d'intégrabilité au sens de Böchner.

Définition 2.2. *Soit $(X, \mathcal{T}, \mu)$ un espace mesuré et $(E, |\cdot|)$ un espace de Banach. Une fonction f de X dans E est mesurable au sens de Böchner lorsqu'il existe (f_n) une suite de fonctions en escaliers telle que pour presque tout t dans X, $f(t) = lim_{n\to\infty} f_n(t)$.*

Remarque : Si f est limite simple presque partout de fonctions étagées alors $|f|$ est une fonction de X dans $\mathbb{R}$ limite simple presque partout de fonctions étagées, donc est mesurable. En prenant f est (f_n) comme dans la définition on a alors pour tout n, $|f - f_n|$ est mesurable.

Définition 2.3. *Soit $(X, \mathcal{T}, \mu)$ un espace mesuré et $(E, |.|)$ un espace de Banach. Une fonction f de X dans E est intégrable au sens de Böchner lorsqu'elle est mesurable au sens de Böchner et qu'il existe (f_n) une suite de fonctions en escaliers telle que $\lim_{n\to\infty} \int_X |f - f_n| = 0$. L'ensemble des fonctions Böchner intégrable est un espace vectoriel.*

On admet la proposition suivante.

Proposition 2.2. *f est Böchner intégrable si et seulement si $|f|$ est mesurable et que $\int_X |f| < \infty$.*

Proposition 2.3. *Soit f Böchner intégrable et (f_n) comme dans la définition. $\int_X f_n$ est de Cauchy. Par complétude, $(\int_X f_n)$ admet une limite dans E. Cette limite est indépendante du choix de (f_n). On notera $\int_X f$ cette limite.*

Preuve. *Montrons d'abord que la suite est de Cauchy. Soit $\epsilon > 0$. Choisissons p entier tel que $\forall n \geq p, \int_X |f - f_n| < \frac{\epsilon}{2}$. Soient m et n supérieurs à p. Par linéarité et inégalité triangulaire :*

$$\left|\int_X f_m - \int_X f_n\right| \leq \int_X |f_m - f_n| \leq \int_X |f_m - f| + \int_X |f - f_n| \epsilon$$

Soit (g_n) vérifiant les mêmes propriétés que f. Notons $I_f := \lim_{n\to\infty} \int_X f_n$ et $I_g := \lim_{n\to\infty} \int_X g_n$. Par linéarité et inégalité triangulaire :

$$0 \leq \left|\int_X f_n - \int_X g_n\right| \leq \int_X |f_n - f| + \int_X |f - g_n|$$

En passant à la limite sachant que $\lim_{n\to\infty} \int_X |f_n - f| = \lim_{n\to\infty} \int_X |f - g_n| = 0$, on obtient $\lim_{n\to\infty} |\int_X f_n - \int_X g_n| = 0 = |I_f - I_g|$ donc $I_f = I_g$

Avec la définition, les propositions concernant les fonctions en escalier on déduit rapidement les propriétés suivantes.

Proposition 2.4. *Soit f fonction Böchner intégrable.*

1. *(Inégalité triangulaire)* $|\int_X f| \leq \int_X |f|$

2. *L'intégration est linéaire sur l'ensemble des fonctions Böchner intégrables.*
3. *L'intégration commute avec les opérateurs linéaires continus.*
4. *Si Φ est une forme linéaire continue sur E, alors $\Phi(\int_X f) = \int_X \Phi \circ f$*

On se place désormais dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^d)$, qui est un espace de Hilbert. Voyons quelques propositions utiles pour la suite.

Proposition 2.5. *Soit f Böchner intégrable dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Par continuité et sesquilinéraité de $\langle\cdot|\cdot\rangle_2$, $\forall g \in L^2(\mathbb{R}^d), \langle\int_X f \ |g\rangle_2 = \int_X \langle f|g\rangle$. De plus, $L^2(\mathbb{R}^d)$ étant un Hilbert, $\int_X f$ est l'unique élément de $L^2(\mathbb{R}^d)$ tel que cette propriété soit vérifiée.*

Remarque : Par densité de $\mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ et de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, il suffit de vérifier la propriété sur un de ces espaces là pour déterminer $\int_X f$.

Proposition 2.6. *Soient $a < b$ des réels. Soit $f : [a, b] \to L^2(\mathbb{R}^d)$. Si f est continue, alors f est intégrable sur $[a, b]$.*

Preuve. *Le théorème de Heine permet d'approcher f uniformément pour $||\cdot||_2$ par des sommes de Riemman. f est donc Böchner mesurable. De plus, par continuité de f, $||f||_2$ est continue sur le segment $[a, b]$ donc y est intégrable.*

Proposition 2.7. *Soit f continue de $\mathbb{R}$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Alors $t \mapsto \int_0^t f$ est C^1 et de dérivée f.*

Preuve. *La preuve est la même que dans le cas réel. On utilise uniquement Chasles, la continuité de f et l'inégalité triangulaire.*

Enfin, l'intégrale de Böchner correspond à l'intégrale point par point :

Proposition 2.8. *Soit $f : X \to L^2(\mathbb{R}^d)$ Böchner-intégrable. Alors presque partout*

$$\left(\int_X f(t)dt\right)(p) = \int_X f(t,p)dt$$

Preuve. *Soit $F : p \mapsto \int_X f(t,p)dt$. On applique le critère de dualité : Soit $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$; Alors*

$$\langle g|F\rangle_2 = \int dp \int_X dt\overline{g(p)}f(t,p)$$

On veut appliquer le théorème de Fubini :

$$\int_X \int dtdp|g(p)f(t,p)| \leq \int_X dt||g||_2||f(t,\cdot)||_2 < \infty$$

car f est Böchner-intégrable. Fubini donne alors :

$$\langle g|F\rangle = \int_X \langle g|f(t)\rangle dt = \left\langle g| \int_X f\right\rangle$$

donc $F = \int_X f$

2.2 Transformée de Fourier

La transformée de Fourier est un objet riche. Dans le cadre de la résolution d'EDPs linéaires, elle permet parfois, comme c'est le cas ici, de se ramener à une équation plus simple. On en donnera quelques définitions et propriétés utiles.

La transformée de Fourier se définit d'abord pour des fonctions régulières puis s'étend par densité à $L^2(\mathbb{R}^d)$. Il est également possible de définir la transformée de Fourier pour les distributions tempérées. On admettra la plupart des résultats de cette section. Commençons par définir quelques espaces de fonctions utiles.

Définition 2.4. *On appelle espace de Schwartz et on note*

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) := \{\Phi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d), \forall(\alpha,\beta) \in \mathbb{N}^m \times \mathbb{N}^n,\ sup_{x\in\mathbb{R}^d}|x^\alpha \partial^\beta f(x)| < \infty\}$$

Définition 2.5. *L'espace de Sobolev $H^2(\mathbb{R}^d)$ est le sous-espace de $L^2(\mathbb{R}^d)$ des fonctions admettant presque partout des dérivées faibles d'ordres 1 et 2, ces dérivées étant $L^2(\mathbb{R}^d)$. On le munit de la norme $||\cdot||_{H^2}$ telle que $||f||_{H^2} = \sum_{|\alpha|\leq 2}||\partial^\alpha f||_2$. $H^2(\mathbb{R}^d)$ muni de cette norme est un espace de Hilbert.*

Définition 2.6. *Soit Φ dans $L^1(\mathbb{R}^d)$. On définit la transformée de Fourier $\hat{\Phi}$ sur $\mathbb{R}^d$ par $\hat{\Phi}(p) := \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ixp}\Phi(x)dx$. On note $\mathcal{F} := \Phi \mapsto \hat{\Phi}$.*

Proposition 2.9. *$\mathcal{F}$ est un opérateur linéaire préservant l'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. $\frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\mathcal{F}$ une isométrie de $(\mathcal{S}(\mathbb{R}^d), ||\cdot||_2)$.*

Proposition 2.10. *$\mathcal{F}$ est uniformément continue sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ pour $||\cdot||_2$. L'espace de Schwartz est dense dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. On peut donc prolonger $\mathcal{F}$ de façon unique en une isométrie de $L^2(\mathbb{R}^d)$ (à multiplication par $(2\pi)^{\frac{d}{2}}$ près).*

Proposition 2.11. *Soient f et g $L^2(\mathbb{R}^d)$. Alors $\langle \mathcal{F}f|g\rangle = \langle f|\mathcal{F}g\rangle$.*

Preuve. *Une application du théorème de Fubini permet de démontrer le résultat dans le cas où f et g sont de Schwartz. Un raisonnement par densité permet d'étendre le résultat à $L^2(\mathbb{R}^d)$.*

On énonce et démontre ici quelques propriétés utiles.

Proposition 2.12. *Soit Φ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Si Φ admet une dérivée faible par rapport à la coordonnée x_k, alors $\mathcal{F}[\partial_k\Phi](p) = ip_k\mathcal{F}[\Phi](p)$*

Preuve. *Soit ϕ dans $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ et Φ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$.*
$\langle \mathcal{F}[\partial_k\Phi]|\phi\rangle_2 = \langle \Phi| - \partial_k\mathcal{F}[\phi]\rangle_2$
ϕ étant de Schwarz, avec une extension du théorème de convergence dominée $\partial_k\mathcal{F}[\phi] = -i\mathcal{F}[x \mapsto x_k\phi(x)]$ (*).
Donc $\langle \Phi| - \partial_k\mathcal{F}[\phi]\rangle_2 = \langle \Phi|i\mathcal{F}[x \mapsto \phi(x)x_k]\rangle_2 = \langle iF[\Phi](x)|x_k\phi]\rangle_2$
$= \langle ix_kF[\Phi](x)|\phi]\rangle$, ce qui donne $\mathcal{F}[\partial_k\Phi](x) = ix_k\mathcal{F}[\Phi](x)$.

De la même manière on montre la proposition suivante.

Proposition 2.13. *Soit Φ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Si $x \mapsto x_k\Phi(x)$ est L^2, alors $\mathcal{F}\Phi$ admet une dérivée faible par rapport à x_k et celle-ci vaut $-i\mathcal{F}[x \mapsto x_k\Phi(x)]$.*

Proposition 2.14. *$\mathcal{F}$ est un automorphisme de $L^2(\mathbb{R}^d)$. Pour tout $f \in L^2(\mathbb{R}^2)$, $\mathcal{F}^{-1}[f](x) = \frac{1}{(2\pi)^d}\mathcal{F}[f](-x)$.*

Preuve. *(ébauche de preuve) Par continuité et densité de l'espace de Schwartz dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ suffit de montrer le résultat sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, on peut le montrer en étudiant la façon dont § se comporte avec les opérateurs de dérivation partielle et de multiplication par une coordonnée.*

Proposition 2.15. *Soient f et g dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. fg est dans $L^1(\mathbb{R}^d)$ et $\mathcal{F}[fg] = \frac{1}{(2\pi)^d}\hat{f} \star \hat{g}$.*

Preuve. *En raisonnant par densité on peut se restreindre à l'espace de Schwartz.*
$\hat{f} \star \hat{g}(p) = \int_\alpha \hat{f}(\alpha)\hat{g}(p-\alpha)d\alpha = \int_\alpha[\int_x e^{-i\alpha x}f(x)\hat{g}(p-\alpha)dx]d\alpha$
L'application $(\alpha, x) \mapsto e^{-i\alpha x}f(x)\hat{g}(p-\alpha)$ est mesurable et inférieur en module à $(\alpha, x) \mapsto |f(x)||\hat{g}|(p-\alpha)$ qui est intégrable, f et $\hat{g}$ étant de Schwartz. On obtient : $\hat{f}\star\hat{g}(p) = \int_x f(x)e^{-ipx}[\int_\alpha \hat{g}(p-\alpha)e^{i(p-\alpha)x}d\alpha dx$ Avec le changement de variable $p' := p - \alpha$ et connaissant l'expression de $\mathcal{F}^{-1}$ on peut conclure.

On a un dernier résultat permettant de caractériser les fonctions de $H^2(\mathbb{R}^d)$.

Proposition 2.16. *Soit f dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Alors $f \in H^2(\mathbb{R}^d)$ si et seulement si $\int |p|^4|\hat{f}(p)|^2dp < \infty$.*

2.3 Evolution d'une particule libre

On s'intéresse dans un premier temps à la résolution de l'équation dans le cas V=0, ce qui correspond physiquement au cas d'une particule libre. On s'intéresse donc à la résolution du problème suivant.

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}+\Delta\psi=0$$
$$\psi|_{t=0}=\psi_0$$
$$\psi\in C^1(\mathbb{R},H^2(\mathbb{R}^d))$$

Soit ψ une solution de (SL). La régularité de ψ permet d'appliquer la transformée de Fourier. $\mathcal{F}$ est linéaire donc pour tout $h\neq 0$,

$\mathcal{F}[\frac{\psi(t+h)-\psi(t)}{h}]=\frac{\mathcal{F}[\psi(t+h)]-\mathcal{F}[\psi(t)]}{h}$. Or $\psi\in C^1(\mathbb{R},H^2(\mathbb{R}^d))$ et $\mathcal{F}$ est continue de $H^2(\mathbb{R}^d)$ dans lui-même donc en faisant tendre h vers 0 $\widehat{\partial_t\psi}=\partial_t\hat{\psi}$.

D'autre part, $\Delta=\sum_{k=1}^d\partial_k^2$. On a étudié plus haut ce qu'était la transformée de Fourier d'une dérivée partielle. On en déduit $\widehat{\Delta\psi}(p)=-|p|^2\hat{\psi}(p)$. On aboutit à équation en $\hat{\psi}$:

$$i\partial_t\hat{\psi}(p)-|p|^2\hat{\psi}(p)=0$$
$$\hat{\psi}|_{t=0}=\hat{\psi}_0$$

Ceci donne une intuition pour la forme de la solution. On peut imahiner que $\hat{\psi}(t,p)=\exp(-it|p|^2)\hat{\psi}_0(p)$ et donc $\psi(t,x)=\mathcal{F}^{-1}[p\mapsto\exp(-it|p|^2)\hat{\psi}_0(p)]$.

Ceci donne lieu pour tout réel t à un opérateur continu :

$$\exp(it\Delta):=\left|\begin{array}{ccc}L^2(\mathbb{R}^d)&\longrightarrow&L^2(\mathbb{R}^d)\\ g&\longmapsto&\mathcal{F}^{-1}[p\mapsto e^{-it|p|^2}\hat{g}(p)]\end{array}\right.$$

On aurait alors $\psi(t)=[\exp(it\Delta)\psi_0]$. Cependant, on ne peut pas résoudre directement l'équation en résolvant pour tout p une EDO linéaire. Le cadre choisi n'est pas le bon. La fonction $\hat{\psi}$ est C^1 de $\mathbb{R}$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Rien de garantit à priori qu'il existe des représentatnts de $\hat{\psi}(t)$ tels que $(t,p)\mapsto\hat{\psi}(t)(p)$ admette une dérivée partielle par rapport à t en presque tout p et qu'elle vérifie l'équation souhaitée.

On va cependant montrer que la solution envisagée convient et qu'elle est unique. Pour l'unicité, il suffit de voir que si $\psi_0=0$, alors $\psi=0$, ce qui s'obtient en retournant à l'équation de départ et en montrant que si ψ est solution de l'équation de Schrödinger pour une particule libre, sa norme L^2 est conservée. Cet argument montre aussi l'unicité d'une solution avec un terme source.

2.3.1 L'opérateur $e^{it\Delta}$

Etudions l'opérateur d'évolution obtenu. Cet opérateur est facilement continu de $L^2(\mathbb{R}^d)$ dans lui-même comme composée de tels opérateurs. L'espace de Schwartz étant stable par tranformée de Fourier et $p\mapsto e^{-it|p|^2}$ étant C^∞ et bornée, $\exp(it\Delta)$ préserve $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$.

Proposition 2.17. *Pour tout réel t,* $\exp(it\Delta)$ *préserve* $H^2(\mathbb{R}^d)$.

Preuve. *Soit f dans $H^2(\mathbb{R}^d)$. $\widehat{\exp(it\Delta)}[f](p)=e^{it|p|^2}\hat{f}(p)$ donc $|\widehat{\exp(it\Delta)}[f](p)|=|\hat{f}(p)|$. La dernière proposition du paragraphe sur la transformée de Fourier permet de conclure.*

En utilisant la façon dont se comporte la transformée de Fourier avec la multiplication par une coordonnée et les dérivations partielles sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, on obtient que pour $\Phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, $\forall\alpha\in\mathbb{N}^n,\partial^\alpha\exp(it\Delta)[\Phi]=\exp(it\Delta)[\partial^\alpha\Phi]$. Par densité de l'espace de Schwatz dans $(H^2(\mathbb{R}^d),||\cdot||_{H_2})$ et par continuité au sens L^2 de $\exp(it\Delta)$, cette propriété s'étend aux éléments de $H^2(\mathbb{R}^d)$.

Proposition 2.18. *Soit n entier inférieur à 2.* $\forall f \in H^2(\mathbb{R}^d), \forall \alpha \in \mathbb{N}^n, \exp(it\Delta)[f] = \exp(it\Delta)[\partial^\alpha f]$

Proposition 2.19. $\exp(it\Delta)$ *est continue de* $(H^2(\mathbb{R}^d), ||\cdot||_{H_2})$ *dans lui-même.*

Preuve. *La proposition précédente et la continuité* L^2 *suffisent à démontrer cette proposition.*

On s'est intéressé aux propriétés de l'opérateur lorque t était fixé. Etudions désormais les propriétés de $t \mapsto exp(it\Delta)f$, où f est dans $H^2(\mathbb{R}^d)$.

Proposition 2.20. *Soit* f *dans* $H^2(\mathbb{R}^d)$. *Alors* $t \mapsto \exp(it\Delta)f$ *est* $C^1(\mathbb{R}, H^2(\mathbb{R}^d))$ *au sens décrit plus haut.*

Preuve. *Montrons d'abord la continuité. Avec le comportement de* $exp(it\Delta)$ *avec les dérivations partielles, pour avoir la continuité* H^2*, il suffit de montrer la continuité* L^2 *lorsque* f *est* L^2*. La transformée de Fourier inverse étant linéaire et continue au sens* L^2*, il reste à montrer que pour* $f \in L^2$, $F := t \mapsto [p \mapsto e^{-it|p|^2}\hat{f}(p)]$ *est continue pour* $||\cdot||_2$.

Soit t *dans* $\mathbb{R}$. *Soit* h *dans* $\mathbb{R}$. $||F(t+h) - F(t)||_2^2 = \int |e^{-i(t+h)|p|^2} - e^{-it|p|^2}|^2 |\hat{f}(p)|^2 dp$

or, $|e^{-i(t+h)|p|^2} - e^{-it|p|^2}|^2| \leq 4$, $|\hat{f}|^2$ *est intégrable et pour presque tout* p, $lim_{h\to 0}|e^{-i(t+h)|p|^2} - e^{-it|p|^2}|^2|\hat{f}(p)|^2 = 0$. *Par le théorème de convergence dominée,* $lim_{h\to 0}||F(t+h) - F(t)||_2^2 = 0$. *On obtient la continuité. Montrons désormais la dérivabilité en temps au sens* L^2. *Par linéarité et continuité pour* $||\cdot||_2$ *de* $\mathcal{F}$*, il suffit encore une fois de montrer que* F *admet une dérivée et que celle-ci est continue. Il faudra cette fois utiliser le caractère* H^2 *de f. Notons* $G(t) := p \mapsto -i|p|^2 e^{-it|p|^2}\hat{f}(p)$. f *étant* H^2, G *est à valeurs dans* $L^2(\mathbb{R}^d)$. *Avec le théorème de convergence dominée à nouveau,* G *est continue pour* $|\cdot|_2$ $\frac{F(t+h)-F(t)-G(t)h|_2^2}{h^2}| = \int |\frac{e^{-i(t+h)|p|^2} - e^{-it|p|^2}}{h} + i|p|^2 e^{-it|p|^2}|^2|\hat{f}(p)|^2 dp = \int |\frac{e^{-ih|p|^2}-1}{h} + i|p|^2|^2 \hat{f}(p)|^2 dp$ *Or par inégalité des accroissements finis,* $\frac{e^{-ih|p|^2}-1}{h}| \leq |p|^2$, *donc avec une inégalité triangulaire,* $|\frac{e^{-ih|p|^2}-1}{h} + i|p|^2|^2\hat{f}(p)|^2 \leq 4|p|^4\hat{f}(p)|^2$, *qui est intégrable, f étant* H^2. *A nouveau avec le théorème de convergence dominée, on obtient que F' existe et est égale à G, donc continue.*

Conclusion : Avec les propriétés sur la dérivation et la transformée de Fourier, on obtient que $i\partial_t e^{it\Delta} f + \Delta e^{it\Delta} f = 0$. De plus, $\exp(i0\Delta)f = f$, ce qui montre que $e^{it\Delta}\psi_0$ est bien solution de l'équation de Schrödinger dans le paragraphe précédent.

2.4 Equation de Schrödinger avec un terme source

Soit f dans $C(\mathbb{R}, L^2(\mathbb{R}^d))$. On s'intéresse désormais à l'équation suivante :

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta\psi = f$$

$$\psi|_{t=0} = \psi_0$$

$$\psi \in C^1(\mathbb{R}, H^2(\mathbb{R}^d))$$

Cette équation n'a pas de sens physique mais sa résolution sera utile pour la suite. Comme précédemment grâce à la régularité des fonctions et au caractère isométrique de $\mathcal{F}$, le problème est équivalent à sa formulation en terme de transformée Fourier :

$$i\partial_t\hat{\psi}(p) - |p|^2\hat{\psi}(p) = \hat{f}(t,p)$$

$$\hat{\psi}|_{t=0} = \hat{\psi}_0$$

En appliquant la formule de Duhamel (en fixant un représentant de $\hat{\psi}_0$), on trouve une intuition pour la forme de la solution :

$$\hat{\psi}(t,p) = \exp(-it|p|^2)\hat{\psi}_0(p) - i\int_0^t \exp(i(t-s)|p|^2)\hat{f}(s,p)ds$$

.

En appliquant $\mathcal{F}^{-1}$, cet opérateur commutant avec l'intégration (par propriétés de l'intégrale de Böchner), on obtient un version fonctionnelle de la formule de Duhamel (en se souvenant du fait que l'intégrale de Böchner coïncide avec l'intégration point par point) :

$$\psi(t) = e^{it\Delta}\psi_0 + i\int_0^t e^{i(t-s)\Delta} f(\cdot, s) ds$$

On vérifie de la même façon que plus haut que cette formule définit bien une solution du problème. L'unicité est garantie par le même argument que pour la particule libre.

3 Développement en série perturbative de la fonction d'onde

3.1 Particule dans un potentiel $\epsilon V(x)$

On traite pour l'instant V comme s'il était déterministe et suffisamment régulier. De façon analogue à ce qui a été fait dans l'introduction avec l'équation de Schrödinger perturbée, on obtient que la solution s'écrit :

$$\psi_\epsilon(t,x) = [e^{it\Delta}\psi_0](x) - i\epsilon\int_0^t [e^{i(t-s)\Delta} V\psi_\epsilon(s)](x) ds$$

En substituant ψ_ϵ à son expression sous l'intégrale, on obtient :

$$\begin{aligned}\psi_\epsilon(t) = [e^{it\Delta}\psi_0] - i\epsilon\int_0^t [e^{i(t-s_1)\Delta} V e^{is_1\Delta}\psi_0] ds_1 \\ + (-i\epsilon)^2 \int_0^t [e^{i(t-s_1)\Delta} V \int_0^{s_1} [e^{i(s_1-s_2)\Delta} V\psi_\epsilon(s_2)] ds_2] ds_1\end{aligned}$$

Par continuité et linéarité de l'opérateur $e^{i(t-s_1)\Delta}V$, on peut intervertir. On obtient alors

$$\begin{aligned}\psi_\epsilon(t) = [e^{it\Delta}\psi_0] - i\epsilon\int_0^t [e^{i(t-s_1)\Delta} V\psi_0] ds_1 \\ + (-i\epsilon)^2 \int_0^t \int_0^{s_1} [e^{i(t-s_1)\Delta} V e^{i(s_1-s_2)\Delta} V\psi_\epsilon(s_2) ds_2] ds_1\end{aligned}$$

En intégrant contre des fonctions de Schwarz (en x), cette intégrale commutant bien avec les deux autres et en effectuant un Fubini et un changement de variables (l'intégrande obtenue étant alors continue en s), on peut ré-écrire :

$$\begin{aligned}\psi_\epsilon(t) = [e^{it\Delta}\psi_0] - i\epsilon\int_0^{+\infty} \mathbb{1}_{s_1 \leqslant t} [e^{is_1\Delta} V\psi_0] ds_1 \\ + (i\epsilon)^2 \int_0^{+\infty}\int_0^{+\infty} [\mathbb{1}_{s_1+s_2 \leqslant t} e^{is_1\Delta} V e^{is_2\Delta} V\psi_\epsilon(t-s_1-s_2) ds_1 ds_2\end{aligned}$$

Enfin, on introduit une intégrale supplémentaire en un paramètre s_0 afin de symétriser les expressions :

$$\begin{aligned}\psi_\epsilon(t) = [e^{it\Delta}\psi_0] + i\epsilon\int_0^{+\infty}\int_0^{+\infty} [e^{is_1\Delta} V\psi_0] \delta(t-s_0-s_1) ds_0 ds_1 \\ + (i\epsilon)^2 \int_0^{+\infty}\int_0^{+\infty}\int_0^{+\infty} e^{is_1\Delta} V e^{is_2\Delta} V\psi_\epsilon(s_0) \delta(t-s_0-s_1-s_2) ds_0 ds_1 ds_2\end{aligned}$$

En itérant le procédé N fois, on obtient le développement suivant :

$$\psi_\epsilon(t) = \sum_{n=0}^{N-1} (i\epsilon^n)\psi^{(n)}(t) + \Phi^{(N)}(t)$$
$$\psi^{(n)}(t) = \int_{\mathbb{R}_+{}^{n+1}} e^{is_1\Delta}V \dots e^{is_n\Delta}\psi_0\delta(t - \sum s)\vec{ds}$$
$$\Phi^N(t) = (i\epsilon)^N \int_{\mathbb{R}_+{}^{N+1}} e^{is_1\Delta}V \dots e^{is_n\Delta}V\psi_\epsilon(s_0)\delta(t - \sum s)\vec{ds}$$

Remarque : Les fonctions ainsi définies sont bien continues de $\mathbb{R}$ dans $H^2(\mathbb{R}^d)$ (on peut le voir en remarquant que si $f \in C(\mathbb{R}, H^2(\mathbb{R}^d))$ alors $t \mapsto \int_0^t f(s)ds$ est dans $C(\mathbb{R}, H^2(\mathbb{R}^d))$.

On cherche à montrer ce développement converge en un certain sens vers ψ_ϵ pour des temps les plus grands possibles. Idéalement, on souhaiterait avoir la convergence pour $t \sim \epsilon^{-2}$ lorsque ϵ tend vers 0. Cette échelle de temps est appelée échelle de temps cinétiques.

3.2 Décomposition selon l'historique de collision, premier contrôle de $\mathbb{E}[||\psi^{(n)}(t)||_2^2]$

Dans cette partie, les calculs sont effectués de façon plus formelles. Les objets utilisés étant complexes, on tentera cependant de donner une explication partielle des opérations effectuées.

En remplaçant V par son expression, on obtient :

$$\psi^{(n)}(t) = \int_{\mathbb{R}_+{}^{n+1}} e^{is_0\Delta}[\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^d} V_\alpha] \dots e^{is_n\Delta}\psi_0\delta(t - \sum s)\vec{ds}$$

On admet que l'on peut intervertir les $\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^d}$ avec les $e^{is\Delta}$ et les $\int_s$. En effectuant successivement ces opérations, on aboutit à :

$$\psi^{(n)}(t) = \sum_{A\in(\mathbb{Z}^d)^n} \int_{\mathbb{R}_+{}^{n+1}} e^{is_0\Delta}V_{\alpha_1} \dots e^{is_n\Delta}\psi_0\delta(t - \sum s)\vec{ds}$$

où $A = (\alpha_k)_{k=1}^n$

Pour tout n dans $\mathbb{N}$, $A \in (\mathbb{Z}^d)^n$, notons $\psi_A(t)$ le terme correspondant dans cette décomposition De la même façon que pour les $\psi^{(n)}$, les ψ_A sont continues de $\mathbb{R}$ dans $H^2(\mathbb{R}^d)$ p.s. On peut alors écrire (si on parvient à justifier les interversions) : $||\psi^{(n)}(t)||_2^2 = \sum_{A,B\in(\mathbb{Z}^d)^n} \langle\psi_A(t)|\psi_B(t)\rangle_2$. La transformée de Fourier est une isométrie de $L^2(\mathbb{R}^d)$ (à un facteur multiplicatif $(2\pi)^d$ près), donc $\langle\hat{\psi_A}(t)|\hat{\psi_B}(t)\rangle_2$. Avec un théorème de Fubini (modulo une intégrabilité), on a alors :

$$\mathbb{E}[||\psi^{(n)}(t)||_2^2] = \sum_{A,B\in(\mathbb{Z}^d)^n} \mathbb{E}[\langle\hat{\psi_A}(t)|\hat{\psi_B}(t)\rangle_2]$$

Si $A = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, ψ_A représente la fonction d'onde d'une particule ayant subi des collisions successives en $\alpha_1, \dots, \alpha_n$. A s'interprète alors comme un historique de collisions. L'indépendance des potentiels en chaque site nous laisse espérer une indépendance entre les termes correspondant à des historiques de collision différents ou au moins que ces termes d'interférence soient petits. Nous verrons que beaucoup d'entre eux sont nuls.

Les opérateurs $e^{it\Delta}$ s'écrivent mieux en travaillant avec les transformées de Fourier. On calcule donc $\hat{\psi_A}(t)$. Par linéarité et continuité de $\mathcal{F}$ de $L^2(\mathbb{R}^d)$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, on peut faire commuter $\mathcal{F}$ avec les inégrales ds_i :

$$\hat{\psi_A}(t) = \int_{\mathbb{R}_+{}^{n+1}} \mathcal{F}[e^{is_0\Delta}V_{\alpha_1} \dots e^{is_n\Delta}\psi_0]\delta(t - \sum s)\vec{ds}$$

. Or par définition de $\exp(it\Delta)$, $\mathcal{F}[e^{it\Delta}g(p)] = e^{-it|p|^2}\hat{g}(p)$, donc

$$\mathcal{F}[e^{is_0\Delta}[V_{\alpha_1}...e^{is_n\Delta}\psi_0]](p) = e^{-is_0|p|^2}\mathcal{F}[V_{\alpha_1} \times (e^{is_1\Delta}V_{\alpha_2}...\psi_0)]$$

La transformée de Fourier d'un produit étant égal au produit de convolution des transformées de Fourier, avec une récurrence sur n, en notant $p_0 := p$ on aboutit à :

$$\mathcal{F}[e^{is_0\Delta}V_{\alpha_1}...e^{is_n\Delta}\psi_0](p) = \int_{(\mathbb{R}^d)^n} e^{-i\sum_{k=0}^n s_k|p_k|^2} \prod_{k=1}^n \widehat{V_{\alpha_k}}(p_{k-1}-p_k)\ \hat{\psi}_0(p_n)d\vec{p}_1...d\vec{p}_n$$

et donc :

$$\widehat{\psi_A}(t,p) = \iint e^{-i\sum_{k=0}^n s_k|p_k|^2} \prod_{k=1}^n \widehat{V_{\alpha_k}}(p_{k-1}-p_k)\ \hat{\psi}_0(p_n)\delta(t-\sum s)d\vec{p}_1...d\vec{p}_n d\vec{s}$$

Cette expression va nous permettre d'effectuer un premier contrôle de $\mathbb{E}\|\psi^{(n)}\|_2^2$.

On a :

$$\|\psi^{(n)}\|_2^2 = \sum_{A\in(\mathbb{Z}^d)^n} \sum_{B\in(\mathbb{Z}^d)^n} \langle\hat{\psi}_A, \hat{\psi}_B\rangle_2$$

Afin de simplifier les calculs nous ferons ici et dans le reste de ce mémoire l'hypothèse que les ψ_A pour lesquels A contient deux indices α_i identiques apportent une contribution négligeable. Cela revient à négliger la recollision de la particule avec un site déjà visité.

L'indépendance des potentiels dûs à chaque site va permettre d'annuler la plupart des termes d'interférence :

On rappelle que $\hat{V}_\alpha(p) = v_\alpha e^{-ip\alpha}\hat{G}(p)$. Ainsi, si $A = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$,

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_A(t,p_0) &= v_{\alpha_1}\ldots v_{\alpha_n} \int\int e^{-I\sum_{k=0}^n s_k|p_k|^2} \prod_{k=1}^n e^{-ip_k\alpha_k}\hat{G}(p_{k-1}-p_k)dp_k d\mu_{n,t}(s) \\ &= v_{\alpha_1}\ldots v_{\alpha_n}F_{n,t}(p)\end{aligned}$$

où $\int d\mu_{n,t}(s) = \int_{\mathbb{R}_+^{n+1}} \delta(t-s_0-\cdots-s_n)d\vec{s}$.

Sous réserve de pouvoir permuter l'espérance et $\sum_A\sum_B$,

$$\mathbb{E}\|\psi^{(n)}\|_2^2 = \sum_A\sum_B \mathbb{E}(v_{\alpha_1}\ldots v_{\alpha_n}v_{\beta_1}\ldots v_{\beta_n})\langle F_{A,t}, F_{B,t}\rangle_2$$

L'indépendance des v_α et $\mathbb{E}(v_\alpha) = 0$ donnent que $\mathbb{E}(v_{\alpha_1}v_{\beta_1}\ldots v_{\alpha_n}v_{\beta_n}) = 0$ dès qu'il existe un α n'apparaissant qu'une seule fois dans le produit. Ainsi, si (A,B) correspond à un terme non nul et $\alpha\in A$, on doit aussi avoir $\alpha\in B$ car α ne peut apparaître deux fois dans A par hypothèse de non recollision. On a également $\alpha\in B \implies \alpha\in A$. B doit donc être une permutation de A. Dans ce cas, les v_{α_i} et v_{β_j} s'apparient deux-à-deux et l'hypothèse $\mathbb{E}(v_\alpha^2) = 1$ donne :

$$\mathbb{E}\|\psi^{(n)}\|^2 = \sum_{A\in(\mathbb{Z}^d)^n}\sum_{\pi\in S_n} \langle F_{A,t}, F_{\pi(A),t}\rangle$$

On note alors $Val(\pi)$ la contribution due à l'appariement selon la permutation π :

$$Val(\pi) = \sum_{A\in(\mathbb{Z}^d)^n} \langle F_{A,t}, F_{\pi(A),t}\rangle = \sum_{A\in(\mathbb{Z}^d)^n} \mathbb{E}\langle\psi_A(t), \psi_{\pi(A)}(t)\rangle$$

Proposition 3.1.

$$\mathbb{E}(\|\psi_A(t)\|^2) = \|F_{A,t}\|^2 \le \left(\frac{t^n}{n!}\|\hat{G}\|_1^n\|\psi_0\|_2\right)^2$$

Preuve. *On a :*

$$|F_{A,t}(p_0)| \leq \int d\mu_{n,t}(s) \int dp_1 \dots dp_n |\hat{\psi}_0(p_n)| \prod_{k=1}^{n} |\hat{G}(p_{k-1} - p_k)|$$

On remarque que les variables s et p ont été découplées. En notant $S_{n,t}$ la masse totale de $\mu_{n,t}$ et en utilisant l'inégalité Young pour la convolution n fois :

$$\|F_{A,t}\|_2 \leq S_{n,t} \|\hat{G}\|_1^n \|\psi_0\|_2$$

Il reste à montrer $S_{n,t} = \frac{t^n}{n!}$. On effectue le changement de variable $(t_i)_{0\leq i \leq n} = \left(\sum_{k=0}^{i} s_k\right)_{0 \leq i \leq n}$ et alors :

$$\int d\mu_{n,t}(s) = \int_{\mathbb{R}^+_{n+1}} \delta(t - \sum_{i=0}^{n} s_k) \vec{ds} = \int_{\mathbb{R}^+_{n+1}} \delta(t - t_n) \vec{dt} = \int_{0 \leq t_0 \leq \dots \leq t_{n-1} \leq t} \vec{dt}$$

Mais, pour tout $\sigma \in S_n$,

$$\int_{0 \leq t_0 \leq \dots \leq t_{n-1} \leq t} \vec{dt} = \int_{0 \leq t_{\sigma(0)} \leq \dots \leq t_{\sigma(n-1)} \leq t} \vec{dt}$$

et $[0,1]^n = \bigsqcup_{\sigma \in S_n} \{t_{\sigma(1)} \leq \dots \leq t_{\sigma(n)}\}$

donc $S_{n,t} n! = t^n$, $S_{n,t} = \frac{t^n}{n!}$

Le contrôle $\|\psi_A(t)\|^2 \leq \frac{t^n}{n!}$ permet d'espérer au mieux, avec l'hypothèse de sommabilité des V_α, un contrôle $Val(\pi) \leq \frac{t^n}{n!}$ puis $\mathbb{E}(|i\epsilon|^{2n} \|\psi^{(n)}(t)\|^2) \leq (\epsilon t)^{2n}$. Cette estimation est satisfaisante pour des temps de l'ordre ϵ^{-1} mais ne suffira pas pour les temps cinétiques $t \sim \epsilon^{-2}$.

3.3 Calcul des $Val(\pi)$

On remarque que dans l'estimation précédente, nous n'avons pas utilisé le caractère oscillant des intégrales ds_i. Pour cela, on peut calculer explicitement le résultat de l'intégration des exponentielles en s sur le n-simplexe à l'aide de l'identité distributionelle suivante :

Proposition 3.2.

$$\forall \eta \in \mathbb{R}, \delta(t - \sum s_j) = e^{\eta(t - \sum s_j)} \int_{\mathbb{R}} e^{i\mu(t - \sum s_j)} d\mu$$

Preuve. *Avec un changement de coordonnées orthogonal de déterminant 1 tel que $e'_0 = (1, \dots, 1)$, on se ramène à montrer*

$$\forall \eta \in \mathbb{R}, \delta(t - s'_0) = e^{\eta(t - s'_0)} \int_{\mathbb{R}} e^{i\mu(t - s'_0)} d\mu$$

Soit f de Schwartz. On rappelle $\langle \delta(t - s_0), f \rangle = \int_{s_0 = t} f$ donc $\delta(t - s_0) = e^{\eta(t - s_0)} \delta(t - s_0)$ D'autre part en notant $\mathcal{F}_0$ la transformée de Fourier selon la première coordonnée uniquement on a :

$$\begin{aligned}
\left\langle \int_{\mathbb{R}} e^{i\mu(t - s_0)} d\mu, f \right\rangle &= \int d\vec{s} \int_{\mathbb{R}} d\mu e^{i\mu(t - s_0)} f(s_0, \dots, s_n) \\
&= \int ds_1 \cdots ds_n \int_{\mathbb{R}} d\mu e^{i\mu t} \mathcal{F}_0 f(\mu, s_1, \dots, s_n) \\
&= \int ds_1 \cdots ds_n f(t, s_1, \dots, s_n)
\end{aligned}$$

C'est l'identité souhaitée.

On peut alors, après avoir permuté les intégrales par rapport à p et s dans $\hat{\psi}_A$, calculer :

$$\begin{aligned}\int_{s_j\geq 0} e^{-i\sum s_j p_j^2}\delta(t-\sum s_j)d\vec{s} &= \int_{s_j\geq 0}\int_{\mathbb{R}} e^{\eta(t-\sum s_j)}e^{i\mu(t-s_0)}e^{-i\sum s_j p_j^2}d\mu d\vec{s} \\ &= e^{\eta t}\int_{\mathbb{R}} e^{i\mu t}\prod_{j=0}^{n}\left(\int_0^{+\infty} e^{-(\eta+i(\mu+p_j^2))s_j}ds_j\right)d\mu \\ &= -ie^{\eta t}\int_{\mathbb{R}} e^{i\mu t}\prod_{j=0}^{n}\frac{1}{\mu+p_j^2-i\eta}d\mu\end{aligned}$$

Finalement :

$$\widehat{\psi_A}(t,p)=\iint e^{(\eta-i\mu)t}\prod_k\frac{\widehat{V_{\alpha_k}}(p_{k-1}-p_k)}{\eta-i\mu-i|p_k|^2}\hat{\psi}_0(p_n)\ d\vec{p}_1\ldots d\vec{p}_n\ d\mu$$

Cette méthode a permis un gain d'intégrabilité en p grâce au caractère oscillant de l'intégrale. On peut désormais donner une formule pour $Val(\pi)$. Soient A et $B=\pi(A)$ permutations l'un de l'autre. La dernière formule et l'argument d'indépendance des V_α donné au paragraphe précédent donne

$$\mathbb{E}\langle\hat{\psi_A}(t)|\hat{\psi_B}(t)\rangle = e^{2\eta t}\iint e^{i\mu t}e^{-i\mu' t}\prod_k\frac{\mathbb{E}[\overline{\widehat{V_{\alpha_k}}}(p_{k-1}-p_k)\widehat{V_{\alpha_k}}(p'_{\pi^{-1}(k)-1}-p'_{\pi^{-1}(k)})]}{(\eta+i\mu+i|p_k|^2)(\eta-i\mu'-i|p'_k|^2)}\overline{\hat{\psi}_0(p_n)}\hat{\psi}_0(p'_n)dpdp'd\mu d\mu'$$

Notons $\mathcal{A}$ l'ensemble des n-uplets de $\mathbb{Z}^d$ sans répétition. Soit π dans S_n. On introduit alors la grandeur (que l'on admet comme étant bien définie au sens des distributions)

$$\Lambda(\pi)((p_k),(p'_k)) := \sum_{A\in\mathcal{A}}\prod_k\mathbb{E}[\overline{\widehat{V_{\alpha_k}}}(p_{k-1}-p_k)\widehat{V_{\alpha_k}}(p'_{\pi^{-1}(k)-1}-p'_{\pi^{-1}(k)})]$$

Les observations physiques tendent à montrer que l'indépendance entre les V_α est très forte, ce qui fait que l'on peut négliger les termes avec une répétition devant les autres. On peut alors écrire avec la formule sommatoire (modulo des termes avec répétition) :

$$\begin{aligned}\Lambda(\pi)((p_k),(p'_k)) &= \sum_{A\in\mathbb{Z}^{dn}}\prod_k\mathbb{E}[\overline{\widehat{V_{\alpha_k}}}(p_{k-1}-p_k)\widehat{V_{\alpha_k}}(p'_{\pi^{-1}(k)-1}-p'_{\pi^{-1}(k)}) \\ &= \prod_k\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^d}\mathbb{E}[\overline{\widehat{V_{\alpha}}}(p_{k-1}-p_k)\widehat{V_{\alpha}}(p'_{\pi^{-1}(k)-1}-p'_{\pi^{-1}(k)})] \\ &= \prod_k H(p_k-p_{k-1})\delta((p_{k-1}-p_k)-(p_{\pi^{-1}(k)-1}-p_{\pi^{-1}(k)}))\end{aligned}$$

où $H:=|\hat{G}|^2$. Cela donne

$$Val(\pi)=e^{2\eta t}\int e^{it(\mu'-\mu)}\frac{\Lambda(\pi)((p_k),(p'_k))\overline{\hat{\psi}_0(p_n)}\hat{\psi}_0(p'_n)}{\prod_k(\eta+i\mu+i|p_k|^2)(\eta-i\mu'-i|p'_k|^2)}\delta(p_0-p'_0)dpdp'd\mu d\mu'$$

On remarque qu'en présence du terme $\prod_k\delta((p_{k-1}-p_k)-(p_{\pi^{-1}(k)-1}-p_{\pi^{-1}(k)}))$, on peut remplacer $\delta(p_0-p'_0)$ par $\delta(p_n-p'_n)$. En effet, les contraintes $p_{k-1}-p_k=p_{\pi^{-1}(k)-1}-p_{\pi^{-1}(k)}$ donnent, en les sommant sur k, puisque $\pi\in S_n$, $p_0-p_n=p'_0-p'_n$ et alors $p_0=p'_0$ si et seulement si $p_n=p'_n$, ce qui donne finalement :

$$Val(\pi)=e^{2\eta t}\int e^{it(\mu'-\mu)}\frac{\Lambda(\pi)((p_k),(p'_k))|\hat{\psi}_0(p_n)|^2}{\prod_k(\eta+i\mu+i|p_k|^2)(\eta-i\mu'-i|p'_k|^2)}\delta(p_n-p'_n)d\vec{p}_1...d\vec{p}_n\ d\vec{p}'_1...d\vec{p}'_nd\mu d\mu'$$

3.4 Contrôle de $Val(Id_n)$

Appliquons la formule précédente au contrôle de $Val(Id_n)$. Nous allons prouver la majoration suivante :

Théorème 3.1. *Pour tout* $0 < \delta < 1$ *et* $n \leq 2$ *:*

$$Val(Id_n) \leq \frac{\epsilon^{2n}(C_\delta t)^n}{n!^{1-\delta}}$$

où C_a *ne dépend que de* a *et de* $\hat{G}$.

On remarque que la formule donnée pour $Val(\pi)$ se simplifie dans le cas $\pi = Id_n$. En effet, les distributions δ se simplifient en $\prod_{j=0}^{n} \delta(p_j - p'_j)$, et alors, en posant :

$$K(t, p, n) = ie^{t\eta} \int d\alpha e^{-i\alpha} \prod_{j=0}^{n} \frac{1}{\alpha - p_j^2 + i\eta}$$

$$d\mu(p) = |\hat{\psi}(p_n)|^2 dp_n \prod_{j=0}^{n} |\hat{G}(p_j - p_{j+1})|^2 dp_j$$

On a, en fixant $\eta = \frac{1}{t}$ pour rendre le préfacteur $e^{\eta t}$ constant,

$$Val(Id_n) = \epsilon^{2n} \int |K(t, p, n)|^2 d\mu(p)$$

Alors le théorème vient des deux contrôles suivants :

Lemme 3.1.

$$|K(t, p, n)| \leq \frac{t^n}{n!}$$

$$\int |K(t, p, n)|^{1+\delta} d\mu(p) \leq (C_a t^\delta)^n$$

En effet,

$$\int |K(t, p, n)|^2 d\mu(p) = \int |K(t, p, n)|^{1-\delta} \int \int |K(t, p, n)|^{1+\delta} d\mu(p) \leq \frac{(t^{1-\delta C_a t^\delta})^n}{n!^{1-\delta}}$$

La première inégalité s'obtient en se souvenant du fait que $K(t, p, n)$ peut s'écrire comme une intégrale d'exponentielles imaginaires sur un n-simplexe (C'est la formule d'intégration des exponentielles au début du paragraphe précédent).

La preuve de la deuxième est plus technique. Le premier obstacle au calcul est que $K(t, p, n)$ est défini par une intégrale, mise à la puissance $1 + \delta$. On veut faire entrer la puissance dans l'intégrale, l'outil adapté est l'inégalité de Hölder. Soit q l'exposant conjugué de $1 + \delta$. On écrit :

$$\prod_{j=0}^{n} \frac{1}{|\alpha - p_j^2 + it^{-1}|} = f(\alpha, p_n, p_{n-1}) g(\alpha, p)$$

avec

$$f(\alpha, p_n, p_{n-1}) = \frac{1}{|\alpha - p_n^2 + it^{-1}|} \frac{1}{|\alpha - p_{n-1}^2 + it^{-1}|}$$

$$g(\alpha, p) = \prod_{j=0}^{n-2} \frac{1}{|\alpha - p_j^2 + it^{-1}|}$$

On a séparé deux facteurs du produit de manière à assurer une intégralité $|f(\alpha)|^q \sim \alpha^{-2}$ avec une pente minimale sur le terme principal en g. On a :

$$|K(t,p,n)|^{1+\delta} = \left\| f^{\frac{1}{q}} f^{\frac{1}{1+\delta}} g \right\|_1^{1+\delta} \leq \left\| f^{\frac{1}{q}} \right\|_q^{1+\delta} \left\| f^{\frac{1}{1+\delta}} g \right\|_{1+\delta}^{1+\delta}$$

Pour l'exposant associé à $\| \cdot \|_q$, on a $\frac{1+\delta}{q} = 1 + \delta(1 - \frac{1}{1+\delta}) = \delta$. Ainsi,

$$|K(t,p,n)|^{1+\delta} \leq \left(\int f(\alpha, p_n, p_{n-1}) d\alpha \right)^{\delta} \int f(\alpha, p_n, p_{n-1}) g(\alpha, p)^{1+\delta} d\alpha$$

L'intégrale de gauche ne dépendant pas de $p_0, \dots, p_{n-1}$, le théorème de Fubini pour fonctions positives permet d'écrire :

$$\int |K(t,p,n)|^{1+\delta} d\mu(p) \leq \int dp_n dp_{n-1} |\hat{\psi}_0(p_n)|^2 |\hat{G}(p_{n-1} - p_n)|^2 \left[\left(\int f d\alpha \right)^{\delta} \right.$$

$$\left. \times \int d\alpha f \int \prod_{j=0}^{n-2} \frac{|\hat{G}(p_j - p_{j+1})|^2}{|\alpha - p_j^2 + it^{-1}|^{1+\delta}} dp_j \right]$$

On peut alors contrôler les intégrales $dp_0 \dots dp_{n-2}$:

Proposition 3.3. *Il existe $C_\delta > 0$ tel que pour tout $t > 0$,*

$$\sup_{\alpha} \sup_{p'} \int \frac{|\hat{G}(p - p')|^2}{|\alpha - p^2 + it^{-1}|^{1+\delta}} dp \leq C_\delta t^\delta$$

Preuve. *On se contente de contrôler le supremum sur α pour $p' = 0$, la preuve générale étant sans idée supplémentaire mais seulement plus calculatoire.*

Quitte à remplacer $|\hat{G}(p)|$ par $\max_{\|p'\| = \|p\|} |\hat{G}(p')|$, ce qui est possible car on n'utilisera que le caractère "décroissance rapide" de $\hat{G}$, on peut supposer que $\hat{G}$ est à symétrie sphérique et passer en coordonnées polaires :

$$\int \frac{|\hat{G}(p)|^2}{|\alpha - p^2 + it^{-1}|^{1+\delta}} dp \leq S \int_0^{+\infty} \frac{|\hat{G}(r)|^2}{|\alpha - r^2 + it^{-1}|^{1+\delta}} r^{d-1} dr$$

où S est la mesure de $\mathbb{S}^{d-1}$.

On cherche à éliminer la dépendance en α de l'intégrale. Pour cela, on fait porter la dépendance en t au terme indépendant de α. On a :

$$\frac{1}{|\alpha - r^2 + it^{-1}|^{1+\delta}} = \frac{t^{1+\delta}}{|t(\alpha - r^2) + i|^{1+\delta}} = \left(\frac{t}{\sqrt{1 + (t(\alpha - r^2))^2}} \right)^{1+\delta} = \left[tu(t(\alpha - r^2)) \right]^{1+\delta}$$

Le changement de variable $x = t(\alpha - r^2)$ $\left(\text{donc } r = \sqrt{\alpha - \frac{x}{t}}\right)$ donne alors :

$$\int_0^{+\infty} \frac{|\hat{G}(r)|^2 r^{d-1}}{|\alpha - r^2 + it^{-1}|^{1+\delta}} dr = \int_{-\infty}^{t\alpha} |\hat{G}(\sqrt{\alpha - \frac{x}{t}})|^2 [tu(x)]^{1+\delta} \sqrt{\alpha - \frac{x}{t}}^{\,d-1-\frac{1}{2}} \frac{dx}{2t}$$

Puisque $d \geq 2$, $d - \frac{3}{2} > 0$ donc $\sup_{\lambda \in \mathbb{R}} |\hat{G}(\lambda)|^2 \lambda^{d-\frac{3}{2}} < \infty$ car $\hat{G}$ est à décroissa,ce rapide. Alors l'intégrale est majorée par

$$C \int_{-\infty}^{t\alpha} t^\delta u(x)^{1+\delta} dx \leq C t^\delta \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{1 + x^2}^{1+\delta}} = C_\delta t^\delta$$

On remarque que l'hypothèse $d > 0$ est essentielle pour assurer l'intégrabilité de $u^{1+\delta}$ dans la preuve précédente. C'est pourquoi on a introduit le paramètre δ dans le contrôle de $Val(Id_n)$, qui n'est pas valable pour $\delta = 0$.

La prochaine étape est alors le contrôle de $\left(\int f d\alpha\right)^{1+\delta}$:

Proposition 3.4.

$$\int f(\alpha, p_n, p_{n-1}) d\alpha \leq \frac{C}{|p_{n-1}^2 - p_n^2 + it^{-1}|} \left(1 + \log_+ \left|\frac{p_{n-1}^2 - p_n^2}{t^{-1}}\right|\right)$$

Preuve. *On simplifie les expresssions avec le changement de variable $x = t(\alpha - p_{n-1}^2)$ et en posant $\lambda = t(p_{n-1}^2 - p_n^2)$:*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\alpha, p_{n-1}, p_n) d\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{t}{|x+i|} \frac{t}{|x+\lambda+i|} \frac{dx}{t}$$

Quitte à effectuer le changement $x' = -x$, on peut supposer $\lambda \geq 0$. L'essentiel de la masse est dans l'intervalle $\left[-\lambda - \frac{\lambda}{2}, +\frac{\lambda}{2}\right]$. L'inégalité de Cauchy-Schwarz donne :

$$\begin{aligned}
\left(\int_{\lambda/2}^{+\infty} \frac{dx}{|x+i||x+\lambda+i|}\right)^2 &\leq \int_{\lambda/2}^{+\infty} \frac{dx}{|x+i|^2} \int_{\lambda/2}^{+\infty} \frac{dx}{|x+\lambda+i|^2} \\
&= \int_{\lambda/2}^{+\infty} \frac{dx}{x^2+1} \int_{3\lambda/2}^{+\infty} \frac{dx}{x^2+1} \\
&= C\left(\frac{\pi}{2} - \arctan\frac{\lambda}{2}\right)\left(\frac{\pi}{2} - \arctan\frac{3\lambda}{2}\right) \\
&\sim C\frac{4}{3\lambda^2}
\end{aligned}$$

car $\frac{\pi}{2} - \arctan x \underset{x\to+\infty}{\sim} \frac{1}{x}$ et, de même,

$$\int_{-\infty}^{-3\lambda/2} \frac{dx}{|x+i||x+\lambda+i|} \leq \frac{C}{\lambda}$$

Concernant la partie centrale,

$$\int_{-\lambda/2}^{\lambda/2} \frac{dx}{|x+i||x+\lambda+i|} \leq \frac{1}{|\frac{\lambda}{2}+i|} \int_{-\lambda/2}^{\lambda/2} \frac{dx}{|x+i|}$$

On a $\frac{1}{|\frac{\lambda}{2}+i|} = \frac{2}{|\lambda+2i|} \leq \frac{2}{|\lambda+i|}$ et en utilisant la parité de la fonction sous l'intégrale :

$$\int_{-\lambda/2}^{\lambda/2} \frac{dx}{|x+i||x+\lambda+i|} \leq \frac{4}{|\lambda+i|} \int_0^{\lambda/2} \frac{dx}{|x+i|} \sim \frac{4}{|\lambda+i|} \log\left(\frac{\lambda}{2}\right)$$

En faisant de même sur $\left[\frac{-3}{2}\lambda, \frac{-1}{2}\lambda\right]$ et en recollant les morceaux on a, pour $\lambda \geq 1$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{|x+i||x+\lambda+i|} \leq \frac{C}{|\lambda+i|}(1 + \log_+(\lambda))$$

Cette inégalité reste vraie pour $\lambda \leq 1$, car l'inégalité de Cauchy-Schwarz donne :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{|x+i||x+\lambda+i|} \leq \pi \leq \pi\frac{\sqrt{2}}{|\lambda+i|}$$

En remplaçant λ par $t(p_{n-1}^2 - p_n^2)$, cela donne l'inégalité annoncée

Bilan des deux dernières propositions :

$$\int |K(t,p,n)|^{1+\delta} d\mu(p) \leq (C_\delta t^\delta)^{n-1} \int dp_n dp_{n-1} |\hat{\psi}_0(p_n)|^2 |\hat{G}(p_{n-1}-p_n)|^2$$
$$\times \frac{C}{|p_{n-1}^2 - p_n^2 + it^{-1}|^{1+\delta}} \left(1 + \log_+ \left|\frac{p_{n-1}^2 - p_n^2}{t^{-1}}\right|\right)^{1+\delta}$$

On contrôle l'intégrale dp_{n-1} :

Proposition 3.5. *Il existe C_δ tel que, pout tout $t > 0$,*

$$\sup_{p_n} \int dp_{n-1} \frac{|\hat{G}(p_{n-1}-p_n)|^2}{|p_{n-1}^2 - p_n^2 + it^{-1}|^{1+\delta}} \left(1 + \log_+ |t(p_{n-1}^2 - p_n^2|\right)^{1+\delta} \leq C_\delta t^\delta$$

Preuve. *La preuve utilise des méthodes semblables à celles utilisées pour la proposition 3.3*

L'intégrale dp_n de $|\hat{\psi}_0|^2$ donne 1, la deuxième inégalité du lemme est alors prouvée, ce qui conclut la démonstration du théorème.

Contrairement au contrôle obtenu en 3.3, celui-ci donne la bonne échelle de temps $t \sim \epsilon^{-2}$. Cependant, le contrôle $Val(\pi) \leq Val(Id_n)$ ne donne pas la convergence de la série perturbative pour $t < \epsilon^{-2}$. Avec un peu plus de travail, on peut voir que ce n'est pas un problème car la limite $\epsilon \to 0$ de $\langle J, W_\psi \rangle$ peut se calculer en prenant d'abord la limite $\epsilon \to 0$ puis $N \to \infty$ de $\langle J, W_{\phi_N} \rangle$.

4 Calculs sur la transformée de Wigner et dérivation de l'équation de Boltzmann

4.1 Propriétés de la transformée de Wigner

Proposition 4.1. *Soit $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Alors, si $g_v(y) = e^{-2ivy}\psi(y)$,*

$$W_\psi(x,v) = 2[\bar{g} * g](2x), \qquad \hat{W}_\psi(\xi, v) = \overline{\hat{\psi}\left(v - \frac{\xi}{2}\right)} \hat{\psi}\left(v + \frac{\xi}{2}\right)$$

où la transformée de Fourier est prise seulement en la variable x (bien définie car $\bar{g} * g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$)

Preuve. *Pour la première formule, effectuer le changement de variable $y = x + \frac{z}{2}$ dans l'intégrale définissant W_ψ. Pour la deuxième, utiliser les formules pour la transformée de Fourier d'une convolution et d'une fonction translatée.*

Proposition 4.2. *Soit $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Alors*

$$\int_{\mathbb{R}^d} W_\psi(x,v)dx = |\hat{\psi}(v)|^2, \qquad \int_{\mathbb{R}^d} W_\psi(x,v)dv = |\psi(x)|^2$$

Preuve. $\int dx$ *: Utiliser la Proposition 3.1 et la formule $\int f * g = (\int f)(\int g)$ $\int dv$: On fixe $x \in \mathbb{R}^d$. On remarque $W_\psi(x,v) = \mathcal{F}_z \left[\overline{\psi\left(x + \frac{z}{2}\right)} \psi\left(x - \frac{z}{2}\right)\right](-v)$ On utilise alors le fait que si $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$,*

$$\begin{aligned} \int dz \mathcal{F}g(z) &= \langle 1, \mathcal{F}g \rangle \\ &= \langle \mathcal{F}1, g \rangle \\ &= \langle \delta, g \rangle \\ &= g(0) \end{aligned}$$

Ceci donne le résultat en posant $g(z) = \overline{\psi\left(x + \frac{z}{2}\right)} \psi\left(x - \frac{z}{2}\right)$.

Proposition 4.3. *Soit $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Alors $W_\psi \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, ce qui permet de considérer la convergence faible de W_ψ^ϵ dans $L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ (dans la limite cinétique)*

Preuve. *D'après l'égalité de Parseval (deuxième égalité) :*

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d}\int_{\mathbb{R}^d} dxdv|W_\psi|^2(x,v) &= \int_{\mathbb{R}^d}\int_{\mathbb{R}^d} dxdv\left|\mathcal{F}_z\left[\overline{\psi\left(x+\frac{z}{2}\right)}\psi\left(x-\frac{z}{2}\right)\right](-v)\right|^2 \\
&= \int_{\mathbb{R}^d}\int_{\mathbb{R}^d} dxdz\left|\overline{\psi\left(x-\frac{z}{2}\right)}\psi\left(x+\frac{z}{2}\right)\right|^2 \\
&\underset{u=x+z/2}{=} \int_{\mathbb{R}^d} du \int_{\mathbb{R}^d} dz\left|\overline{\psi(u-z)}\psi(u)\right|^2 \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} du[|\psi|^2 * |\psi|^2](u) \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} |\psi|^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\psi|^2 < \infty
\end{aligned}$$

4.2 Contrôle de $\langle J, W_\phi\rangle$

Un pas vers l'obtention du théorème 1.1 est le contrôle de la quantité $\langle J, \mathbb{E}W_\phi\rangle$ pour J de Schwartz. Le contrôle des variations de cette quantité nous permettra d'appliquer un argument de densité permettant de nous ramener au cas où ψ_0 est de Schwartz. Dans la suite, si $u(x,v)$ est une fonction de $L^2(\mathbb{R}^d)$, $\hat{u}(\xi, v)$ désigne sa transformée de Fourier prise par rapport à la première variable seulement.

Lemme 4.1. *Soit J de Schwartz, alors $\psi \mapsto \langle J, \mathbb{E}W_\phi\rangle$ est continue est continue sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ pour la norme L^2. De plus, si $\phi, \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ et $\delta = \langle J, \mathbb{E}W_\psi\rangle - \langle J, \mathbb{E}W_\phi\rangle$, alors*

$$|\delta| \leq \Big(\int d\xi \sup_{v\in\mathbb{R}^d}|\hat{J}(\xi,v)|\Big)\Big(\sqrt{\mathbb{E}||\psi||^2}+\sqrt{\mathbb{E}||\phi||^2}\Big)\Big(\mathbb{E}||\hat{\psi}-\hat{\phi}||^2\Big)^{1/2}$$

Preuve. *Nous ne présentons pas la preuve, qui est assez peu intéressante en elle-même. Il s'agit de contrôler δ en utilisant les transformées de Fourier de J et W_ψ et de jongler avec la formule de $\hat{W}_\psi$*

Ce lemme permet de justifier le fait que l'on puisse raisonner par densité et supposer que ψ_0 est de Schwartz. En effet, il montre l'uniforme continuité en Φ_N des quantités $\langle J, \mathbb{E}W_{\Phi_N(t)}\rangle$ et on a vu que les Φ_N sont elles-mêmes des fonctions uniformément continues en ψ_0. Le lemme permet également d'étudier la transformée de Wigner en calculant celle de Φ_N puis en passant à la limite sur N :

Corollaire. *Si ψ_0 est de Schwartz et $||\psi_0|| = 1$, alors*

$$|\langle J, \mathbb{E}W_{\psi(t)}\rangle - \langle J, \mathbb{E}W_{\Phi_N(t)}\rangle| \leq \left(1+\sqrt{\mathbb{E}||\Phi_N||^2}\right) t \left[\sup_{0\leq s\leq t}\mathbb{E}||\epsilon V\psi^{(N-1)}(s)||^2\right]^{1/2}$$

Preuve. *On applique le lemme précédent avec $\psi = \psi(t)$, $\phi - \Phi_N$, de telle sorte que $\psi - \phi = \Psi_N$:*

$$|\langle J, \mathbb{E}W_{\psi(t)}\rangle - \langle J, \mathbb{E}W_{\Phi_N(t)}\rangle| \leq \sqrt{\mathbb{E}||\Psi_N||^2}\left(\sqrt{\mathbb{E}||\psi(t)||^2}+\sqrt{\mathbb{E}||\Phi_N||^2}\right)$$

Les fonctions d'onde sont normalisées $||\psi(t)|| = 1$. L'équation de Schrödinger conserve cette pro-

priété donc l'opérateur d'évolution e^{-itH} est une isométrie, ce qui permet de contrôler $||\Psi_N||^2$:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}||\psi_N||^2 &= \mathbb{E}\left\|\int_0^t ds\, e^{-i(t-s)H}\lambda V\psi^{(N-1)}(s)\right\|^2 \\
&\leq \mathbb{E}\left(\int_0^t ds \left\|e^{-i(t-s)H}\lambda V\psi^{(N-1)}(s)\right\|\right)^2 \\
&= \mathbb{E}\left(\int_0^t ds \left\|\lambda V\psi^{(N-1)}(s)\right\|\right)^2 \\
\text{(Cauchy-Schwarz)} \quad &\leq \mathbb{E}t\int_0^t ds \left\|\lambda V\psi^{(N-1)}(s)\right\|^2 \\
\text{(Fubini pour fonctions positives)} \quad &= t\int_0^t \mathbb{E}\left\|\lambda V\psi^{(N-1)}(s)\right\|^2 ds \\
&\leq t^2 \sup_{0\leq s\leq t} \mathbb{E}\left\|\lambda V\psi^{(N-1)}(s)\right\|^2
\end{aligned}$$

où la première inégalité vient d'un résultat semblable à l'inégalité de Jensen :

Proposition 4.4. *Soit $u : [0,1] \to L^2(\mathbb{R}^d)$ telle que $(s,p) \mapsto u(s)(p)$ soit de carré intégrable. Alors $I : p \mapsto \int_0^t u(s)(p)ds$ est de carré intégrable et*

$$\|I\| \leq \int_0^t ds\|u(s)\|$$

Preuve. *C'est une conséquence immédiate de l'inégalité triangulaire pour l'intégrale de Böchner et du fait qu'elle correspond à l'intégrale point par point. On donne aussi une preuve plus élémentaire de la proposition : D'abord, $I \in L^2(\mathbb{R}^d)$:*

$$\int_{\mathbb{R}^d} |I(p)|^2 dp \leq \int_{\mathbb{R}^d} t\int_0^t |u(s)(p)|^2 ds dp \leq +\infty$$

Pour prouver l'inégalité, on s'inspire de la preuve de l'inégalité de Jensen en minorant $\|\cdot\|$ à l'aide de sa différentielle en I :

$$\langle I, \frac{I}{\|I\|}\rangle = \|I\|, \qquad \forall v \in L^2(\mathbb{R}^d), \langle v, \frac{I}{\|I\|}\rangle \leq \|v\|$$

Alors :

$$\begin{aligned}
\int_0^t \|u(s)\|ds &\geq \int_0^t \langle u(s), \frac{I}{\|I\|}\rangle ds \\
&= \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \overline{u(s)(p)}\frac{I(p)}{\|I\|} dp ds
\end{aligned}$$

On souhaite permuter les intégrales, on vérifie les hypothèses de Fubini :

$$\int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} |u(s)(p)\frac{I(p)}{\|I\|}| dp ds \leq \int_0^t \|u(s)\|^2 \left(\frac{\|I\|}{\|I\|}\right)^2 < +\infty$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
\int_0^t \|u(s)\|ds &\geq \int_{\mathbb{R}^d}\int_0^t \overline{u(s)(p)} ds \frac{I(p)}{\|I\|} dp \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \overline{I(p)}\frac{I(p)}{\|I\|} dp \\
&= \|I\|
\end{aligned}$$

4.3 Calcul des premiers termes de la transformée de Wigner

Afin de voir émerger l'équation de collision de Boltzmann, on calcule les quantités $\langle J, W_\Phi^\epsilon \rangle$. On rappelle que $\Phi_N = \sum_{n=0}^{N-1} \psi^{(n)}$. À la vue des formules dont nous disposons, il est préférable d'utiliser $\hat{W}_{\Phi_N}^\epsilon$ pour mener ce calcul :

$$\begin{aligned}
\hat{W}_{\Phi_N}^\epsilon(\xi, v) &= \hat{\Phi}_N \left(v - \frac{\epsilon}{2}\xi\right) \hat{\Phi}_N \left(v + \frac{\epsilon}{2}\xi\right) \\
&= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n'=0}^{N-1} \overline{\hat{\psi}_t^{(n')} \left(v - \frac{\epsilon}{2}\xi\right)} \hat{\psi}_t^{(n)} \left(v + \frac{\epsilon}{2}\xi\right)
\end{aligned}$$

On pose $\hat{W}_{n,n',t}^\epsilon = \overline{\hat{\psi}_t^{(n')} \left(v - \frac{\epsilon}{2}\xi\right)} \hat{\psi}_t^{(n)} \left(v + \frac{\epsilon}{2}\xi\right)$ On peut calculer les $\hat{\psi}_t^{(n)}$ avec la formule

$$\widehat{\psi_t}^{(n)}(p) = \iint e^{-i \sum_{k=0}^{n} s_k |p_k|^2} \prod_{k=1}^{n} \widehat{V}(p_{k-1} - p_k)\ \hat{\psi}_0(p_n) \delta(t - \sum s) d\vec{p}_1 ... d\vec{p}_n d\vec{s}$$

Afin de simplifier l'interprétation physique, on considère dans cette sous-section que H s'écrit $H = \frac{-1}{2}\Delta + V$. Ainsi la relation de dispersion s'écrit $\omega = \frac{1}{2}p^2$ et la vitesse $v = \nabla\omega = p$ coïncide avec l'impulsion. Cela a pour conséquence de remplacer les p^2 dans l'expression de $\psi^{(n)}$ par des $\frac{p^2}{2}$.

4.3.1 Terme $n = n' = 0$

Dans ce cas, $\hat{\psi}_t^{(0)}(p) = e^{-it\frac{p^2}{2}} \hat{\psi}_0(p)$. Alors,

$$\begin{aligned}
\hat{W}_{0,0,t}^\epsilon(\xi, v) &= exp\left(\frac{-it}{2}\left[\left(v + \frac{\epsilon^2}{2}\xi\right)^2 - \left(v - \frac{\epsilon^2}{2}\xi\right)^2\right]\right) \\
&= e^{-i\epsilon^2 tv\cdot\xi} \hat{W}_0^\epsilon(\xi, v)
\end{aligned}$$

où W_0^ϵ est la transformée de Wigner de ψ_0.
En intégrant $\hat{W}_0^\epsilon$ contre des fonctions de l'espace de Schwartz, le théorème de convergenve dominée montre qu'au sens des distributions, $\hat{W}_0^\epsilon(\xi, v) \overset{\epsilon\to 0}{\longrightarrow} |\psi(\hat{v})|^2$. Ainsi, dans la limite cinétique $(t = \epsilon^{-2}T)$:

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon\to 0} \langle \hat{J}, \hat{W}_{0,0,t}^\epsilon \rangle &= \langle \hat{J}, e^{-iTv\cdot\xi} |\psi(\hat{v})_0|^2 \rangle \\
&= \int dv |\hat{\psi}_0(v)|^2 \int d\xi \hat{J}(\xi, v) e^{-iTv\cdot\xi} \\
&= \int dv |\hat{\psi}_0(v)|^2 J(Tv, v)
\end{aligned}$$

Ce terme peut être interprété comme un terme d'évolution libre. En effet, dans le développement $\Phi_N = \sum_{n=0}^{N-1} \psi^{(n)}$, le terme n correspond à l'évolution après n collisions. Pour $n = 0$, on devrait avoir l'évolution libre. C'est le cas : si on fixe v, une particule classique évolue selon l'équation $x = Tv$. Le résultat de la mesure de l'observable J au temps T est donc $J(Tv, v)$. En moyennant contre la distribution initiale de vitesse $|\psi(v)_0|^2 dv$, on obtient bien $\lim_{\epsilon\to 0} \langle J, W_{0,0,t}^\epsilon \rangle$.

4.3.2 Terme $n = n' = 1$

Les termes suivants $n = n' = 0$ sont d'ordre 2. En effet, les termes $n = 0$, $n' = 1$ et $n = 1$, $n' = 0$ ne font apparaître qu'un seul terme de potentiel dans l'expression de $W_{1,0,t}^\epsilon$. En passant

à l'espérance, l'hypothèse $\mathbb{E}V_\alpha = 0$ donne $\mathbb{E}\langle J, W^\epsilon_{1,0,t}\rangle = 0$.
Calculons $\mathbb{E}W^\epsilon_{1,1,t}$. En posant $k = v + \frac{\epsilon^2}{2}\xi$ et $k' = v - \frac{\epsilon^2}{2}\xi$:

$$\begin{aligned}
W^\epsilon_{1,1,t}(\xi, v) &= \overline{\hat{\psi}^{(1)}(k')}\hat{\psi}^{(1)}(k) \\
&= (-i\epsilon)\int_0^1 ds\, e^{-i(t-s)\frac{k^2}{2}} \int dk_0 \hat{V}(k-k_0)e^{-is\frac{k_0^2}{2}}\hat{\psi}_0(k_0) \\
&\quad \times (i\epsilon)\int_0^1 ds'\, e^{-i(t-s')\frac{k'^2}{2}} \int dk_0' \overline{\hat{V}(k'-k_0')}e^{-is\frac{k_0'^2}{2}}\overline{\hat{\psi}_0(k_0')}
\end{aligned}$$

On passe à l'espérance en utilisant :

$$\mathbb{E}\left[\overline{\hat{V}(k'-k_0')}\hat{V}(k-k_0)\right] = |\hat{G}(k-k_0)|^2\delta(k'-k_0'-(k-k_0))$$

Simultanément, on effectue le changement de variables $k_0' = v_0 - \frac{\epsilon^2}{2}\xi_0$, $k_0 = v_0 + \frac{\epsilon^2}{2}\xi_0$, sous lequel :

$$dk_0'dk_0 = \left|\begin{pmatrix} 1 & \frac{-\epsilon^2}{2} \\ 1 & \frac{\epsilon^2}{2} \end{pmatrix}\right| d\xi_0 dv_0 = \epsilon^2 d\xi_0 dv_0$$

Ainsi, $\hat{\psi}_0(k_0)\overline{\hat{\psi}_0(k_0')} = \hat{W}^\epsilon_0(\xi_0, v_0)$ et $\delta(k'-k_0'-(k-k_0)) = \delta(\epsilon^2(\xi_0-\xi))$.
On a donc :

$$\mathbb{E}\hat{W}^\epsilon_{1,1,t}(\xi, v) = \epsilon^2\int_0^t\int_0^t dsds' \int\int \epsilon^2 dv_0 d\xi_0 \delta(\epsilon^2(\xi_0-\xi))s|\hat{G}(k-k_0)|^2 e^{\frac{i\Phi}{2}}\hat{W}^\epsilon_0(\xi_0, v_0)$$

où la phase Φ rassemble les phases apparaissant dans les exponentielles :

$$\Phi = -(t-s)k^2 - sk_0^2 + (t-s')k'^2 + s'k_0'^2$$

Sous la contrainte $\xi = \xi_0$ imposée par le terme $\delta(\epsilon^2(\xi_0-\xi))$, on a $k - k_0 = v - v_0$. En simplifiant $\int \epsilon^2 d\xi_0 f(\xi_0)\delta(\epsilon^2(\xi_0-\xi)) = f(\xi)$, on obtient :

$$\mathbb{E}\hat{W}^\epsilon_{1,1,t}(\xi, v) = \epsilon^2\int_0^t\int_0^t dsds' \int_{\mathbb{R}^d} dv_0|\hat{G}(v-v_0)|^2 e^{\frac{i\Phi}{2}}\hat{W}^\epsilon_0(\xi, v_0)$$

On simplifie l'expression de Φ en fonction de v_0, v, ξ :

$$\begin{aligned}
\Phi &= -(t-s)\left(v + \frac{\epsilon^2}{2}\xi\right)^2 - s\left(v_0 + \frac{\epsilon^2}{2}\xi\right)^2 + (t-s')\left(v - \frac{\epsilon^2}{2}\xi\right)^2 + s'\left(v_0 - \frac{\epsilon^2}{2}\xi\right)^2 \\
&= (s-s')(v^2 - v_0^2) - 2\epsilon^2\left[\left(t - \frac{s+s'}{2}\right)v + \frac{s+s'}{2}v_0\right]\xi
\end{aligned}$$

s, s' s'interprètent comme les instants de collision des fonctions d'onde $\overline{\psi}, \psi$ à une collision apparaissant dans l'expression de $\hat{W}_{1,1,t}$. On pose alors $\tau = s - s'$ la désynchronisation entre les collisions et $T_0 = \epsilon^2\frac{s+s'}{2}$ l'instant de la collision, remis à l'échelle cinétique. On effectue le changement de variable $dsds' = \frac{1}{\epsilon^2}d\tau dT_0$. On calcule maintenant $\langle \hat{J}, \mathbb{E}\hat{W}^\epsilon_{1,1,t}\rangle$ pour J de Schwartz en utilisant l'identité distributionnelle :

$$\int d\tau exp\left(i\tau\frac{v^2 - v_0^2}{2}\right) = 2\pi\delta\left(\frac{v^2 - v_0^2}{2}\right)$$

En posant $\sigma(v, v_0) = 2\pi\delta\left(\frac{v^2-v_0^2}{2}\right)|\hat{G}(v-v_0)|^2$, et en utilisant $\hat{W}^\epsilon_0(\xi, v_0) \xrightarrow{\epsilon\to 0} |\hat{\psi}_0(v_0)|^2$:

$$\langle \hat{J}, \mathbb{E}\hat{W}^\epsilon_{1,1,t}\rangle \xrightarrow{\epsilon\to 0} \int\int\int d\xi dv dv_0 \int_0^T dT_0 e^{-i[(T-T_0)v + T_0 v_0]\xi}\sigma(v, v_0)\hat{J}(\xi, v)|\hat{\psi}_0(v_0)|^2$$

$$\langle \hat{J}, \mathbb{E}\hat{W}^{\epsilon}_{1,1,t}\rangle \xrightarrow{\epsilon\to 0} \int\int dv dv_0 \sigma(v, v_0) \int_0^T dT_0 J((T-T_0)v + T_0 v_0, v)|\hat{\psi}_0(v_0)|^2$$

Analysons physiquement ce résultat. On trouve dans l'argument pris par J une dynamique semblable à celle observée pour $n = n' = 0$: on a un mouvement libre à la vitesse initiale v_0 jusqu'à ce qu'il y ait collision au temps T_0. La particule repart alors avec une vitesse v. $\sigma(v, v_0)$ s'interprète comme le noyau de collision. L'apparition de $\delta(\frac{v^2-v_0^2}{2})$ traduit le fait que la norme de la vitesse de la particule est conservée lors d'une collision, ce qui est le cas lorsque les atomes occupant les sites du réseau sont beaucoup plus lourds que la particule.

Pour traiter entièrement l'ordre 2, il faut regarder les cas $n' = n = 0$. Ils donnent des termes de perte, nous ne présentons pas leur calcul ici.

5 Bibliographie

— Distributions, analyse de Fourier, équations aux dérivées partielles F. Golse
http ://www.cmls.polytechnique.fr/perso/golse/MAT431-10/POLY431.pdf

— Làszlò Erdös, "Lecture notes on Quantum Brownian Motion", Ecole de Physique des Houches, 2010.

— Làszlò Erdös and Horng-Tzer Yau, "Linear Boltzmann equation as the weak coupling limit of a random Schrödinger equation, " Communications on Pure and Applied Mathematics 53.6 (2000) : 667-735.