Séminaire Équations aux dérivées partielles - École Polytechnique

A. Martinez

# Estimations de l'effet tunnel pour le double-puits

*Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)* (1985-1986), exp. nº 15, p. 1-8

<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1985-1986____A15_0>

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

CENTRE DE MATHÉMATIQUES

91128 PALAISEAU CEDEX - FRANCE

Tél. (6) 941.82.00 - Poste N°
Télex : ECOLEX 691 596 F

SÉMINAIRE ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES 1985 - 1986

# ESTIMATIONS DE L'EFFET TUNNEL POUR LE DOUBLE-PUITS

par A. MARTINEZ

Exposé n°XV

18 Mars 86

## § 0. INTRODUCTION :

Cet exposé est un résumé des deux articles à paraître [5] et [6]. Dans les deux cas, il s'agit d'obtenir à partir des résultats généraux de B. Helffer et J. Sjöstrand ([2], [3]), des estimations du splitting pour les états excités de l'opérateur de Schrödinger $P = -h^2\Delta + V$ lorsque $h$ tend vers 0. On considère uniquement le cas du double-puits symétrique, c'est-à-dire le cas où la fonction $V$ (qui est $C^\infty$ et réelle) admet un hyperplan de symétrie, et donne naissance, pour le niveau d'énergie considéré, à deux puits de part et d'autre de cet hyperplan.

Physiquement, cela correspond à deux atomes identiques qui inter-agissent pour former une molécule. A chaque raie du spectre d'émission d'un de ces atomes correspond alors deux raies, exponentiellement proches, du spectre d'émission de la molécule. Le splitting désigne l'écart entre ces deux raies, et c'est celui-ci que l'on se propose de minorer dans certains cas.

Il est à noter qu'une minoration du splitting entre les deux plus basses valeurs propres de $P$ avait déjà été obtenue par B. Simon dans [7], et, avec plus de précision, par Helffer et Sjöstrand dans [2].

## § 1. POSITION DU PROBLEME.

Sur $L^2(\mathbb{R}^n)$, on pose $P = -h^2\Delta + V$, où $V$ est une fonction $C^\infty$ réelle. Sans perte de généralité, on étudie le spectre de $P$ près du niveau 0. On suppose :

(1) $V(x',x_n) = V(x',-x_n)$

(2) $\{V \leqslant 0\} = U_1 \cup U_2$ où les $U_j$ sont compacts, connexes, disjoints, et symétriques l'un de l'autre par rapport à $x_n = 0$.

(3) $\displaystyle\lim_{|x|\to\infty} V(x) > 0$.

$P$ est alors semi-borné, et de spectre discret près de 0. Suivant la théorie d'Helffer-Sjöstrand, on note $M_1$ et $M_2$ deux compacts assez grands de $\mathbb{R}^n$, symétriques l'un de l'autre par rapport à $x_n = 0$, et à bord $C^2$, tels que :

$$U_j \subset \overset{\circ}{M_j} \quad , \text{ et } \quad M_j \cap U_k = \emptyset \quad \text{si } j \neq k .$$

Soient aussi $P_{M_j}$ $(j = 1,2)$ la réalisation auto-adjointe de $P$ dans $L^2(M_j)$

avec condition de Dirichlet au bord (on a donc $Sp(P_{M_1}) = Sp(P_{M_2})$) , et $E(h)$ une valeur propre simple de $P_{M_1}$ telle que $E(h) \to 0$ lorsque $h \to 0$ . On note $u = u(x,h)$ la fonction propre normalisée associée. (Ici, $h$ varie dans un ensemble $\mathcal{J} \subset ]0,1]$ qui contient $0$ dans son adhérence).

On suppose en outre :

(4) $\exists a(h) > 0$ non-exponentiellement petite (i.e. $\forall \varepsilon > 0$ , $\exists c_\varepsilon > 0$ t.q. $a(h) \geqslant \frac{1}{c_\varepsilon} e^{-\varepsilon/h}$) telle que :

$$Sp(P_{M_1}) \cap [E(h)-2a(h),\ E(h)+2a(h)] = \{E(h)\}.$$

On peut alors appliquer les résultats de [2] à l'intervalle $I(h) = [E(h)-a(h),\ E(h)+a(h)]$ , ce qui donne :

$$Sp(P) \cap I(h) = \{E^+,E^-\}$$

avec :

$$\forall \varepsilon > 0 \ , \ \exists c_\varepsilon > 0 \ \text{ t.q. } \ 0 \leqslant E^+ - E^- \leqslant c_\varepsilon e^{-(S_o-\varepsilon)/h}$$

où $S_o$ désigne la distance d'Agmon (i.e. associée à la métrique $\max(V,0)dx^2$) entre les deux puits : $S_o = d(U_1,U_2)$ .

Plus précisément, si $\mathcal{F}$ est l'espace propre associé à $Sp(P) \cap I(h)$, alors $P|_{\mathcal{F}}$ admet pour matrice (dans une base orthonormée convenable) :

$$M = \begin{pmatrix} E & W \\ W & E \end{pmatrix} + \mathcal{O}(e^{-(S_o+\varepsilon_o)/h})$$

où $\varepsilon_o > 0$ , et (si par exemple $U_1 \subset \{x_n > 0\}$), $W = -2h^2 \int_\Sigma u \frac{\partial u}{\partial x_n} dx'$ , $\Sigma$ étant un voisinage (arbitrairement petit) dans $\{x_n = 0\}$ du compact $\{d(x,U_1) = d(x,U_2) = \frac{S_o}{2}\}$ .

On a en particulier :

$$E^+ - E^- = 4h^2 \int_\Sigma u \frac{\partial u}{\partial x_n} dx' + \mathcal{O}(e^{-(S_o+\varepsilon_o)/h})$$

et il s'agit d'obtenir, à l'aide de cette expression, des estimations (et notamment une minoration) de $E^+ - E^-$ .

§ 2. RESULTATS.

On va considérer deux différentes sortes de puits, selon que le niveau 0 constitue le fond des puits ou non.

i) Puits ponctuels non-dégénérés :
On suppose ici :

(5) pour $j = 1,2$, $U_j = \{x_j\}$ , $V''(x_j) > 0$ , et $\exists\ c_o > 0$ t.q. $E(h) \in [0,c_o h]$ .

Dans ce cas, on sait que E(h) admet un développement asymptotique en demi-puissances de h , et on remarque qu'une condition suffisante pour que (4) soit vérifiée est que E(h) soit asymptotiquement simple, c'est à dire qu'aucune autre valeur propre de $P_{M_1}$ n'admette le même développement que E(h).

D'autre part, lorsque E(h) est la plus basse valeur propre de $P_{M_1}$ , Helffer et Sjöstrand on démontré que :

$$\exists\ c > 0 \quad \text{t.q.}\ \frac{1}{c}\, h^{1/2}\, e^{-S_o/h} \leqslant E^+ - E^- \leqslant c\, h^{1-\frac{n}{2}}\, e^{-S_o/h} \quad .$$

Leur résultat se généralise de la manière suivante (cf[5]) :

Théorème 1 : Si les hypothèses (1) à (5) sont satisfaites, alors il existe $c > 0$ telle que :

$$\frac{1}{c}\, h^{1/2}\, e^{-S_o/h} \leqslant E^+ - E^- \leqslant c\, h^{1-\frac{n}{2}-\alpha^+}\, e^{-S_o/h}$$

pour h assez petit.
Ici, $\alpha^+$ est relié à $E_o = \lim\limits_{h\to o} \frac{E(h)}{h}$ par :

$$\alpha^+ = \operatorname{Max}\{|\alpha| \ \text{t.q.}\ \alpha \in \mathbb{N}^n \ ,\ \sum_{j=1}^{n} (\alpha_j + \frac{1}{2})\mu_j = E_o\}$$

où $\mu_j > 0$ , les $\mu_j^2$ étant les valeurs propres de $2V''(x_1)$

Remarque : On a un résultat analogue lorsqu'on ne suppose plus E(h) simple, mais de multiplicité constante $N_o$.Cependant, une hypothèse supplémentaire (apparemment technique) apparaît, à savoir :

$$\forall\ \alpha \in \mathbb{N}^n \ ,\ \sum_{j=1}^{n} (\alpha_j + \frac{1}{2})\mu_j = E_o \Rightarrow |\alpha| = \alpha^+ \quad .$$

Les $2N_o$ valeurs propres de P issues de E(h) se regroupent alors en $N_o$ paires vérifiant les inégalités du théorème 1.

ii) Etats hautement excités :

On remplace ici (5) par :

(5') $\qquad V$ est analytique, $\overset{\circ}{U}_j \neq \emptyset$ , et $dV|_{\partial U_j} \neq 0$ .

Dans ce cas, le splitting va être étroitement lié au comportement de $u$ près du bord de $U_1$ .

Plus précisément, si on appelle $G$ l'ensemble des géodésiques minimales (pour la métrique d'Agmon) entre $U_1$ et $U_2$ , on a (cf.[6]) :

Théorème 2 : Sous les hypothèses (1) à (4) et (5'), et si de plus :

$$(*)\left\{\begin{array}{l}\forall\, \varepsilon > 0,\ \forall\, w \text{ voisinage de } \bigcup_{\gamma\in G} (\gamma \cap \partial U_1)\ ,\ \exists\, c_{\varepsilon,w} > 0 \text{ t.q.}\\ \|u\|_{L^2(w)} \geq \dfrac{1}{c_{\varepsilon,w}}\, e^{-\varepsilon/h}\end{array}\right.$$

alors, $\forall\, \varepsilon > 0$ , $\exists\, c_\varepsilon > 0$ t.q. $E^+ - E^- \geq \frac{1}{c_\varepsilon} e^{-(s_o+\varepsilon)/h}$ pour $h$ assez petit.

Remarque : En dimension 1 , l'hypothèse (*) est automatiquement satisfaite. En dimension supérieure, une condition suffisante pour qu'elle le soit est que :

$$\forall\, W \text{ voisinage dans } T^*\mathbb{R}^n \text{ de } \bigcup_{\gamma\in G} (\gamma \cap \partial u_1) \times \{0\}\ ,$$

$$\bigcup_{t\in\mathbb{R}} \exp t\, H_p(W) \text{ est un voisinage de } \{\xi^2 + V(x) = 0\} \cap \pi^{-1}(U_1)$$

où $\pi$ est la projection naturelle $T^*\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ .

D'autre part, les résultats de [1] montrent que si le flot de $H_p$ est ergodique sur $\{\xi^2 + V = 0\} \cap \pi^{-1}(U_1)$, alors "presque toutes" les valeurs propres de $P_{M_1}$ vérifient (*). On n'a cependant aucun moyen de savoir si certaines de ces "presque toutes" sont simples et vérifient (4).

Le résultat suivant est la réciproque du théorème 2 :

Théorème 3 : Si (1) à (4) et (5') sont satisfaites, et si $\exists\, \varepsilon > 0$ , $\exists\, w$ voisinage de $\bigcup_{\gamma\in G} (\gamma \cap \partial U_1)$ t.q. $\|u\|_{L^2(w)} = \mathcal{O}(e^{-\varepsilon/h})$ , alors $\exists\, \varepsilon_o > 0$ t.q. $E^+ - E^- = \mathcal{O}(e^{-(S_o+\varepsilon_o)/h})$ lorsque $h \to 0$ .

On donne dans [6] un exemple explicite où ce dernier résultat s'applique.

§ 3. IDEES DES PREUVES.

i) Pour le théorème 1, on utilise le développement BKW de $u$ (cf. [2]) pour construire un calcul pseudo-différentiel formel, ramenant l'étude de $E^+ - E^-$ à celle de $h\|u\|^2_{L^2(\Sigma)}$ .

On examine ensuite l'ordre d'annulation de $u$ en $x_1$ puis, par un argument de propagation, on parvient à majorer l'ordre d'annulation de $u$ en $\gamma \cap \{x_n = 0\}$ , où $\gamma$ désigne une géodésique minimale (relativement à d) entre $x_1$ et $x_2$ .

La minoration de $\|u\|^2_{L^2(\Sigma)}$ , puis de $E^+ - E^-$ , s'ensuit sans trop de difficultés.

ii) Pour le théorème 2, on commence par établir un contrôle de $u$ lorsque $h \to 0$ , et dans un voisinage complexe de $\Sigma$ . Après quoi le calcul pseudo-différentiel de Sjöstrand [8] peut s'appliquer, et permet de se ramener encore à l'étude de $\|u\|^2_{L^2(\Sigma)}$ . On modifie aussi les quantités $U_1$ , $U_2$ , et $d$ en remplaçant $V$ par $V-E$ , où $E$ est désomrmais considéré comme un paramètre supplémentaire.

Soit $\gamma$ une géodésique minimale entre $U_1$ et $U_2$ , $\{z_o\} = \gamma \cap \{x_n = 0\}$ , $y_o \in \gamma \cap \{x_n < 0\}$ assez proche de $z_o$ , et $\{z_1\} = \gamma \cap \partial U_1$ . On note aussi $z_2 = \pi(\exp t_o H_p(z_1,0))$ où $t_o > 0$ est assez petit. Le lemme suivant va permettre de construire des solutions asymptotiques de l'équation $Pv = Ev$ :

<u>Lemme</u> : Il existe deux fonctions $F_\pm(y,z)$ qui sont $C^\infty$ pour $y$ près de $y_o$ , et $z$ dans un voisinage de $\overline{\gamma \cap \{x_n \geqslant 0\}}$ ; analytiques au voisinage de $(y_o,z_2)$ , vérifiant $(\nabla_z F_\pm)^2 = V(z) - E$ , $F_+ = \overline{F}_-$ , et :

- pour $z \in \{x_n \geqslant 0\} \setminus \gamma$ , $\mathrm{Re}\, F_\pm + d(z, U_1) > 0$

- pour $z$ voisin de $z_o$ , $F_\pm = \mathrm{Re}\, F_\pm = d(y,z) - d(y,U_1)$ .

D'autre part, si $\Sigma'$ est une hypersurface transverse à $\gamma$ en $y_o$ , et si $\Gamma$ est une hypersurface orthogonale à $\{\exp t H_p(z_1,0),\ t \in \mathbb{R}\}$ en $z_2$ , (avec des coordonnées locales respectives $y'$ sur $\Sigma'$ et $z'$ sur $\Gamma$ ), alors $F_\pm$ vérifient :

$$\mathrm{Re}\ \frac{\partial^2 F_\pm}{\partial z'^2}(y_o,z_2) > 0$$

(3.1) $$\det \frac{\partial^2 F_\pm}{\partial y'\partial z'}(y_o,z_2) \neq 0$$

$$\nabla_{z'} F_\pm(y_o,z_2) = 0 \quad .$$

La construction de $F_\pm$ est inspirée de celle qu'ont faite Helffer et Sjöstrand dans [4] § 10 . D'autre part, les propriétés (3.1) montrent que l'application (formelle) :

$$\mathcal{D}'(\Gamma) \ni w \to \int_\Gamma e^{-F_\pm(y',z')/h} w(z')dz' \in A(\Sigma')$$

définit une transformation de Fourier-Bros-Iagolnitzer (cf.[8]).
Grâce à l'équation eiconale $(\nabla_z F_\pm)^2 = V(z) - E$, il n'est pas difficile de construire des solutions asymptotiques de $(P(z,D_z)-E)v = 0$ , qui s'écrivent sous la forme $v_\pm(y,z) = a_\pm(y,z,h)e^{-F_\pm(y,z)/h}$ , où $a_\pm$ est un symbole analytique classique (ceci n'est en fait valable qu'en dehors d'un voisinage de $z_1$ . Près de $z_1$ , $v_\pm$ s'expriment sous la forme d'une intégrale d'Airy ).

On définit ensuite une notion d'ensemble de fréquences analytique, inspirée de celle de front d'onde analytique :

<u>Définition</u> : Pour $\tilde\Omega \subset \mathbb{C}^n$ , $\tilde\Omega \cap \mathbb{R}^n = \Omega \neq \emptyset$ , et $u(x,h)$ holomorphe en $x$ dans $\tilde\Omega$ , et vérifiant (avec $c_o > 0$) :

$$\forall \varepsilon > 0 \ ,\ u = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{(c_o|\mathrm{Im}x|+\varepsilon)/h}) \text{ lorsque } h\to 0 \ ,$$

on définit $FS_a(u) \in T^*\Omega$ par :

$$(x_o,\xi_o) \notin FS_a(u) \Leftrightarrow \begin{cases} \exists \varepsilon > 0 \text{ t.q. } \int e^{[i(x-\alpha_x)\alpha_\xi-(x-\alpha_x)^2]/h}\chi(x)u(x,h)dx \\ \quad = \mathcal{O}(e^{-\varepsilon/h}) \text{ uniformément pour } \alpha \text{ près de } (x_o,\xi_o). \\ \text{(Ici, } \chi \in C_o^\infty(\Omega) \text{ vaut 1 près de } x_o) \ . \end{cases}$$

$FS_a(u)$ microlocalise la notion d'exponentiellement petit, et se trouve avoir essentiellement les mêmes propriétés que le front d'onde analytique d'une distribution.
En utilisant la formule de Green à un ouvert convenable centré sur $(\gamma \cap \{x_u \geq 0\}) \cup \{\exp t\, H_p(z_1,0),\ 0 \leq t \leq t_o\}$ , on trouve :

Si $\exists\, \varepsilon > 0$ t.q. $\|u\|^2_{L^2(\Sigma)} = \mathcal{O}(e^{-(S_o+\varepsilon)/h})$, alors $\exists\, \varepsilon' > 0$ t.q.

$\int_\Gamma (\frac{\partial u}{\partial z_n} v_\pm - u \frac{\partial v_\pm}{\partial z_n})\, dz' = \mathcal{O}(e^{-\varepsilon'/h})$ (où on a noté $\Gamma = \{z_n = 0\}$) .

On utilise ensuite les transformations de Fourier-Bros-Ingolmitzer définies par $v_+$ et $v_-$ pour en déduire :

$$(z_2',0) \notin FS_a(u_{|\Gamma}) \cup FS_a(\frac{\partial u}{\partial z_n}{}_{|\Gamma})$$ , puis, par les propriétés

de $FS_a(u)$ (problèmes au bord, et propagation) :

$$(z_1,0) \notin FS_a(u)$$

d'où il s'ensuit que $u$ est uniformément exponentiellement petite près de $z_1$ , et donc une contradiction avec (*) .
Le théorème 3 est une simple conséquence d'un résultat de propagation de $FS_a$ .

BIBLIOGRAPHIE :


[1] B. Helffer, A. Martinez, D. Robert : Ergodicité et limite semi-classique, à paraître.

[2] B. Helffer, J. Sjöstrand : Multiple wells in the semi-classical limit I, comm. in P.D.E., 9 (4), 337-408 (1984).

[3] B. Helffer, J. Sjöstrand : Puits Multiples en limite semi-classique II, Interaction moléculaire, Symétries, Perturbation, Annales de l'IHP (section physique théorique), vol. 42 n°2 , 127-212 (1985)

[4] B. Helffer, J. Sjöstrand : Résonances en limite semi-classique, à paraître.

[5] A. Martinez : Estimations de l'effet tunnel pour le double puits I, à paraître au J. de Math. Pures et App.

[6] A. Martinez : Estimations de l'effet tunnel pour le double puits II, Etats hautement excités, à paraître.

[7] B. Simon : Semi-classical analysis of low lying eigenvalues II , Annals of Math., 120, 89-118 (1984).

[8] J. Sjöstrand : Singularités analytiques microlocales, Astérisque 95 (1982)

*
* *
*