ANNALES DE L'I. H. P., SECTION A

B. HELFFER
B. PARISSE

Comparaison entre la décroissance de fonctions propres pour les opérateurs de Dirac et de Klein-Gordon. Application à l'étude de l'effet tunnel

Annales de l'I. H. P., section A, tome 60, nº 2 (1994), p. 147-187
<http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1994__60_2_147_0>

Ann. Inst. Henri Poincaré,

Vol. 60, n° 2, 1994, p. 147-187. *Physique théorique*

Comparaison entre la décroissance de fonctions propres pour les opérateurs de Dirac et de Klein-Gordon. Application à l'étude de l'effet tunnel

par

B. HELFFER

UA 762, D.M.I., École Normale Supérieure,
45, rue d'Ulm, 75230 Paris Cedex 05,
France

et

B. PARISSE

UA 188, Institut Fourier,
Université de Grenoble-I, 38402 Saint-Martin-d'Hères Cedex,
France

RÉSUMÉ. — Motivé par des questions posées par R. Carmona dans [2], on étudie ici l'opérateur de Klein-Gordon :

$$K = \mathrm{Op}_w^h(\sqrt{1+\xi^2} + V(x))$$

en comparaison avec l'opérateur de Dirac :

$$D(h) = h \sum_{j=1}^{3} \alpha_j D_j + \alpha_4 + V(x) . I_4.$$

et plus précisément la décroissance de fonctions propres de ces opérateurs. Ces deux opérateurs décrivent des particules en relativité restreinte, particules de spin nul pour Klein-Gordon et de spin $\frac{1}{2}$ pour Dirac, il est donc naturel de comparer les résultats obtenus. Lorsque le potentiel varie peu, par exemple en limite non relativiste, on montrera que les résultats sont compatibles. En revanche, on verra qu'il existe des cas, typiquement quand le potentiel varie plus que l'énergie de masse de la particule, où les résultats de décroissance diffèrent. On exhibera ainsi deux exemples où l'effet tunnel permet de distinguer ces deux opérateurs, l'un relatif à la limite semi-classique, l'autre à l'approximation du tight-binding.

ABSTRACT. — Motivated by questions posed by R. Carmona in [2], we study the decays of the eigenfunctions of the Klein-Gordon and Dirac operators:

$$\mathrm{K}=\mathrm{Op}_w^h(\sqrt{1+\xi^2}+\mathrm{V}(x)),$$

$$\mathrm{D}(h)=h\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\mathrm{D}_j+\alpha_4+\mathrm{V}(x).\mathrm{I}_4.$$

These operators descibe particules in restricted relativity, of spin 0 for the Klein-Gordon and of spin $\frac{1}{2}$ for the Dirac operator, so it is natural to compare the results. When the variation of the potential is small, as in the nonrelativistic limit, we show that the results are compatibles. On the other hand, we will see that there are cases, typically when the potential varies more than the energy of the mass of the particle, where the decays are different. We give two examples where the tunneling effect allows one to distinguish these two operators, one relative to the semi-classical limit, the other to the tight-binding approximation.

---

1. HYPOTHÈSES

Considérons l'opérateur de Klein-Gordon défini sur $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n;\mathbb{C})$ par

$$\mathrm{K}=\mathrm{Op}_w^h(\langle\xi\rangle+\mathrm{V}(x)), \tag{1}$$

où $\mathrm{V}(x)$ est le potentiel, supposé C^∞ et vérifiant :

$$\lim_{\|x\|\to\infty}\mathrm{V}(x)=-1, \tag{2}$$

et où :

$$\langle\xi\rangle=\sqrt{1+\xi^2} \tag{3}$$

Ici, pour un symbole a dans une classe convenable (*cf.* [14], [19]), on définit $\mathrm{Op}_w^h(a)$ par :

$$(\mathrm{Op}_w^h(a)\phi)(x)=\frac{1}{(2\pi h)^n}\iint e^{i(x-y)\cdot\xi/h}\,a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\phi(y)\,dy\,d\xi, \tag{4}$$

pour $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

Sous l'hypothèse supplémentaire que toutes les dérivées de V sont bornées, on montre que K est essentiellement autoadjoint (*cf.* [11] par exemple). Le spectre essentiel de cet opérateur est sous l'hypothèse (2) contenu dans $[0, \infty[$ et on va regarder des propriétés des fonctions propres correspondant à des valeurs propres dans $]-\infty, 0]$.

Sauf à la section 3.2, on supposera désormais que la dimension n est égale à 3 pour pouvoir comparer les propriétés spectrales de l'opérateur de Klein-Gordon avec celles de l'opérateur de Dirac défini sur $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ par :

$$D(h) = h \sum_{j=1}^{3} \alpha_j D_j + \alpha_4 + V(x) . I_4, \tag{5}$$

où les α_j sont des matrices hermitiennes 4×4 vérifiant :

$$\alpha_n \alpha_m + \alpha_m \alpha_n = 2\delta_{m,n} \qquad \text{pour} \quad 1 \leqq m, n \leqq 4. \tag{6}$$

Les matrices de Dirac α_j sont définies à partir des 3 matrices 2×2 de Pauli notées σ_j par :

$$\left.\begin{array}{l} (\alpha_j) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} (j = 1, 2, 3), \qquad \alpha_4 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \\ \text{où} \\ \sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \end{array}\right\} \tag{7}$$

On montre alors que l'opérateur de Dirac commute avec l'opérateur antilinéaire de Kramers noté K (ou $\mathcal{K}$ selon la section) défini par :

$$K \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \\ \bar{u}_4 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Ceci permet entre autres de montrer que les espaces propres de $D(h)$ sont de dimension paire.

On suppose de plus que :

$$\operatorname{Min} V(x) < -1. \tag{9}$$

Remarque 1. — Dans les formules (1) et (5) définissant les opérateurs de Klein-Gordon et de Dirac, on a normalisé l'énergie de masse mc^2 de la particule décrite à 1. Montrons comment on passe de la forme habituelle de ces opérateurs à la forme normalisée pour l'opérateur de Dirac (on procéderait de manière identique pour l'opérateur de Klein-Gordon et on obtiendrait les mêmes formules de passage).

L'opérateur de Dirac non normalisé est défini par :

$$D_\hbar^m = \hbar c \sum_{j=1}^{3} \alpha_j D_j + mc^2 \alpha_4 + \tilde{V}(x) . I_4, \tag{10}$$

où $\tilde{V}(x)$ désigne le potentiel (par exemple un potentiel coulombien multiplié par la charge de la particule,...).

Pour se ramener à la forme (5), on voit qu'il faut diviser (10) par l'énergie de masse mc^2. Donc les valeurs propres « physiques » de $D_\hbar^m$ sont obtenues en multipliant les valeurs propres de l'opérateur $D_{\hbar/mc^2}$ avec potentiel $V(x) = \tilde{V}(x)/mc^2$ par mc^2. En résumé, on a les correspondances :

$$h = \frac{\hbar}{mc}, \qquad V(x) = \frac{\tilde{V}(x)}{mc^2}, \qquad E_m(\hbar) = mc^2 E(h). \tag{11}$$

L'équation (11) s'applique aussi à l'opérateur de Klein-Gordon.

Sous l'hypothèse (9), on sait qu'il apparaît des valeurs propres de K dans l'intervalle $]-\infty, 0[$ lorsque $h \to 0$. Une manière de le voir est de choisir un $\alpha > 0$ tel que :

- $-\alpha - 1$ n'est pas valeur critique de V
- $$\operatorname{Min} V(x) < -1 - \alpha \tag{12}$$

et de donner la formule de Weyl pour la fonction de comptage des valeurs propres contenues dans l'intervalle $I_\alpha :=]-\infty, -\alpha]$. Ainsi, on a [*cf.* par exemple [11], [19] ([1])]

$$N_h^K(I_\alpha) = \frac{1}{(2\pi h)^3} \left(\int_{\sqrt{1+\xi^2} + V(x) < -\alpha} dx\, d\xi + O(h) \right). \tag{13}$$

Ceci montre bien que, dans la limite semi-classique, on voit apparaître de plus en plus de valeurs propres. On peut bien entendu intégrer par rapport à ξ et réécrire cette formule sous la forme :

$$N_h^K(I_\alpha) = \frac{c_3}{h^3} \left(\int_{V(x) < -1-\alpha} ((-\alpha - V)^2 - 1)^{3/2} dx + O(h) \right). \tag{14}$$

Plus généralement, on peut prendre $I_\alpha(\beta) = [-\beta, -\alpha]$ avec $\beta > \alpha$ et $-\beta$ non-valeur critique et obtenir pour le nombre de valeurs propres contenues dans $I_\alpha(\beta)$ la formule :

$$N_h^K(I_\alpha(\beta)) = \frac{c_3}{h^3} \left(\int_{-1-\beta < V(x) < -1-\alpha} ((-\alpha - V)^2 - (-\beta - V)^2)^{3/2} dx + O(h) \right). \tag{15}$$

([1]) On peut remarquer que les inégalités d'Agmon permettent d'établir la théorie de Helffer-Robert sous des hypothèses beaucoup plus faibles en dehors de la zone classiquement permise, *cf.* Helffer [8] ou Ivrii (*voir* les références dans [15]).

Dans cet article, on s'intéresse d'abord au comportement des fonctions propres associées. Si ϕ_K^h est une fonction propre de K d'énergie $E(h) < -\alpha$, qu'on supposera de norme 1, on peut s'intéresser à la décroissance de ϕ_K^h sous deux aspects :

• A h fixé, quel est le comportement de $\phi_K^h(x)$ lorsque $\|x\|$ tend vers ∞?

• Dans un compact fixe $\mathcal{K}$ de $\mathbb{R}^3$, quel est la décroissance de $\|\phi_K^h(x)\|_{L^2(\mathcal{K})}$ quand h tend vers 0?

Considérons maintenant les problèmes analogues pour l'opérateur de Dirac (²). Sous l'hypothèse (2), le spectre essentiel de l'équation de Dirac est contenu dans

$$]-\infty, -2] \cup [0, \infty[.$$

Le traitement semi-classique du comptage du nombre de valeurs propres de l'opérateur de Dirac est connu (*cf.* par exemple [11], [15, p. 266-267], [21]) et si $I_\alpha(\beta)$ est un intervalle comme ci-dessus à bornes non critiques, mais avec cette fois :

$$0 < \alpha < \beta < 2,$$

on peut de nouveau compter les valeurs propres et obtenir :

$$N_h^D(I_\alpha(\beta)) = \frac{1}{(2\pi h)^3} \times \left(2 \int_{-\beta < \sqrt{1+\xi^2} + V(x) < -\alpha} dx\, d\xi \right.$$
$$\left. + 2 \int_{-\beta < \sqrt{1+\xi^2} - V(x) < -\alpha} dx\, d\xi + O(h)\right). \quad (16)$$

En particulier, si $V \leqq 1$, on a :

$$N_h^D(I_\alpha(\beta)) = 2 N_h^K(I_\alpha(\beta)) + O(h^{-2}), \quad (17)$$

où le facteur 2 correspond aux deux spins possibles $\left(\pm \frac{1}{2}\right)$. Ceci suggère la question de savoir si l'estimation du reste peut être améliorée. Il faudrait sans doute introduire Klein-Gordon plus et Klein-Gordon moins, de symboles respectifs :

$$p^+ = V(x) + \sqrt{1+\xi^2}, \qquad p^- = V(x) - \sqrt{1+\xi^2}.$$

pour avoir un meilleur résultat.

Si ϕ_D^h est une fonction propre de l'opérateur $D(h)$ d'énergie $E(h) \in]-\beta, -\alpha[$ de norme 1, on peut de nouveau s'intéresser à la décroissance de ϕ_D^h sous deux aspects et comparer avec $\phi_K(h)$.

(²) Ici, on suppose que toutes les dérivées de V sont bornées, ce qui assure que le problème est essentiellement auto-adjoint (*cf.* par exemple [16]). On renvoie à l'ouvrage de B. Thaller [22] et aux travaux de Helffer, Nourrigat, Wang [10] pour affaiblir les hypothèses sur le potentiel V.

L'estimation du taux de décroissance des fonctions propres étant directement reliée à la mesure de l'effet tunnel, on obtiendra ainsi des résultats intéressants sur l'effet tunnel. Inspiré par l'article de Carmona [2] et une question posée à la fin de son article, on va exhiber des cas où les deux modèles relativistes donnent des réponses significativement différentes.

2. QUELQUES RÉSULTATS NON SEMI-CLASSIQUES

2.1. Résultats de Carmona-Masters-Simon pour l'opérateur de Klein-Gordon

Dans son exposé, R. Carmona [2] rapporte les résultats suivants de [3] concernant la fonction propre ϕ_K (on a pris $h=1$) attachée à une énergie $E<0$.

Sous les hypothèses de la section 1, on a :

$$\forall \varepsilon>0, \quad \exists C_\varepsilon>0, \qquad \|\phi_K(x)\| \leqq C_\varepsilon e^{-m_\varepsilon |x|}. \tag{18}$$

De plus, si $\phi_K(x)$ correspond à la première fonction propre, qu'on peut alors choisir positive, on a :

$$\forall \varepsilon>0, \quad \exists \tilde{C}_\varepsilon>0, \qquad \|\phi_K(x)\| \geqq \tilde{C}_\varepsilon e^{-\tilde{m}_\varepsilon |x|}. \tag{19}$$

Ici, on a posé :

$$\begin{aligned} m_\varepsilon &= \sqrt{2|E|-E^2}-\varepsilon \qquad \text{si} \quad |E| \leqq 1 \\ &= 1 \qquad \text{sinon}, \\ \tilde{m}_\varepsilon &= \sqrt{2|E|-E^2}+\varepsilon \qquad \text{si} \quad |E| \leqq 1 \\ &= 1 \qquad \text{sinon}. \end{aligned} \tag{20}$$

Ce résultat est en particulier intéressant parce que, d'une part, il met en jeu deux comportements de décroissance selon les valeurs de E, et que, d'autre part, il est optimal (à ε près) pour le niveau fondamental.

Il serait donc très intéressant d'avoir un analogue semi-classique de ce résultat. On donnera des résultats partiels dans la sous-section 3.2.

2.2. Résultats non semi-classiques pour l'opérateur de Dirac

On considère le cas $h=1$. Soit $\phi_D(x)$ une fonction propre de l'opérateur de Dirac associée à une énergie E dans :

$$-2<\beta<E<-\alpha<0.$$

On utilisera la distance d'Agmon pour estimer la décroissance exponentielle comme par exemple dans Wang ([23]). On rappelle que la métrique d'Agmon est donnée par [*cf.* l'équation (23) ci-dessous]:

$$(1-(\mathrm{V}(x)-\mathrm{E})^2)_+ \, dx^2. \tag{21}$$

Pour x assez grand, $|\mathrm{V}(x)-(-1)|$ est petit et la métrique se rapproche de :

$$(1-(-1-\mathrm{E})^2)_+ \, dx^2=(-2\mathrm{E}-\mathrm{E}^2)_+ \, dx^2.$$

Posons donc pour $\varepsilon>0$,

$$d_\varepsilon=\sqrt{(-2\mathrm{E}-\mathrm{E}^2)_+}-\varepsilon. \tag{22}$$

et comparons la décroissance exponentielle d'une fonction propre au poids d_ε.

Cette étude résulte des inégalités à poids, où on prend ici $h=1$ (*cf.* [23], Prop. 2.1):

$$h^2 \int \left\| \nabla \left(e^{\varphi(x)/h} u(x) \right) \right\|^2 dx + \int \left(1-\mathrm{V}(x)^2-\|\nabla \varphi(x)\|^2 \right) e^{2\varphi(x)/h} \|u(x)\|^2 \, dx = \Re \left(\int e^{2\varphi(x)/h} (\mathrm{D}_{-\mathrm{V}} \mathrm{D}_\mathrm{V} u(x) \mid u(x))_{\mathbb{C}^4} \, dx \right) \tag{23}$$

pour toute fonction φ uniformément lipschitzienne et bornée, et pour toute fonction $u \in \mathrm{H}^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ (On a noté D_V l'opérateur de Dirac avec potentiel V, et donc $\mathrm{D}_{-\mathrm{V}}$ celui obtenu en prenant $-\mathrm{V}$ comme potentiel).

On prend alors comme poids φ le poids φ_R défini par :

$$\begin{aligned} \varphi_\mathrm{R}(x) &= d_\varepsilon |x| \qquad \text{si} \quad |x| \leqq \mathrm{R} \\ &= d_\varepsilon \mathrm{R} \qquad \text{sinon.} \end{aligned} \tag{24}$$

On montre maintenant sans difficultés que :

$$\forall \varepsilon>0, \quad \exists\, \mathrm{C}_\varepsilon>0, \qquad |\phi_\mathrm{D}(x)\| \leqq \mathrm{C}_\varepsilon e^{-d_\varepsilon |x|}, \tag{25}$$

où on rappelle que d_ε a été défini à l'équation (22).

En effet, il existe r_0 indépendant de R tel que :

$$1-(\mathrm{V}(x)-\mathrm{E})^2-|\nabla \varphi_\mathrm{R}|^2 \geqq \varepsilon\, d_0, \qquad \text{si} \quad |x| \geqq r_0.$$

On en déduit avec les inégalités de l'équation (23), en remplaçant le potentiel qui y figure par $\mathrm{V}(x)-\mathrm{E}$, une majoration des intégrales $\int_{|x| \geqq r_0}$ par $\frac{1}{\varepsilon} \int_{|x| \leqq r_0}$. On fait ensuite tendre R vers $+\infty$ et on en déduit finalement l'équation (25).

2.3. Comparaison entre résultats non semi-classiques

Comparons la décroissance de ϕ_D et de ϕ_K donnée aux équations (18), (19), (25) dans leur domaine commun d'application, c'est-à-dire pour des énergies $E \in]-2, 0[$. On a alors $d_\varepsilon = m_\varepsilon$ pour $E \geqq -1$. Par contre, pour $E \langle -1, m_\varepsilon \rangle d_\varepsilon$, donc $e^{-m_\varepsilon |x|} \ll e^{-d_\varepsilon}$. La décroissance des fonctions propres ϕ_K de K semble être plus rapide que celle des fonctions propres ϕ_D de D. Pour être plus précis, il faudrait avoir une minoration de $|\phi_D|$ analogue à la minoration (19).

Pour obtenir un comportement divergent au niveau des valeurs propres, il est alors logique d'étudier le problème du *tight-binding* (*cf.* la thèse de F. Daumer [4] dans le cas de l'opérateur de Schrödinger).

Le niveau d'énergie E étant choisi, on pose

$$V(x) = V(x, R) := -1 + W(x + R\vec{e}_1) + W(x - R\vec{e}_1), \tag{26}$$

où W est une fonction positive tendant assez vite vers 0 à l'infini (par exemple W à support compact), et $\vec{e}_1 \in \mathbb{R}^3$ est un vecteur de norme 1.

Pour simplifier les calculs, supposons que W est à support compact. On prend comme potentiel de référence $V = -1 + W$ et, si on note ϕ_K la première fonction propre normalisée associée à la valeur propre E de l'opérateur $\langle -\Delta \rangle - 1 + W$, on prendra comme quasimodes pour l'opérateur $\langle -\Delta \rangle + V$:

$$\phi^+ = \phi_K(x + R\vec{e}_1) \qquad et \qquad \phi^- = \phi_K(x - R\vec{e}_1). \tag{27}$$

On obtient ainsi un espace de dimension 2 qui approche l'espace propre correspondant aux deux valeurs propres très proches de E (lorsque R tend vers l'infini). Le splitting dû à l'effet tunnel est de l'ordre de $e^{-2m_0 R}$, à un facteur $e^{\pm \varepsilon R}$ près, lorsque $|E| < 1$ et est de l'ordre de e^{-2R} lorsque $|E| > 1$.

En effet, on a :

$$K\phi^+ = E\phi^+ + r^+, \tag{28}$$

$$r^+ = W(x - R\vec{e}_1)\phi^+. \tag{29}$$

Or, en appliquant l'équation (18) à $\phi^\pm$, on trouve :

$$|\phi^+(x)| \leqq C_\varepsilon e^{-m_\varepsilon |x + R\vec{e}_1|}, \qquad |\phi^-(x)| \leqq C_\varepsilon e^{-m_\varepsilon |x - R\vec{e}_1|}, \tag{30}$$

Donc, comme $W(x - R\vec{e}_1)$, est à support compact près de $x = R\vec{e}_1$

$$\| r^+ \| \leqq C_\varepsilon e^{-2Rm_\varepsilon}, \tag{31}$$

quitte à modifier C_ε, puisque la taille du support de W ne dépend pas de R. De même, on a :

$$|(\phi^+ | \phi^-)| \leqq C_\varepsilon e^{-2Rm_\varepsilon}, \qquad |((K - E)\phi^+ | \phi^-)| \leqq C_\varepsilon e^{-2Rm_\varepsilon}, \tag{32}$$

Ces deux équations et la Proposition 2.5 de [12] permettent de montrer que les valeurs propres sont exponentiellement proches de E avec une majoration du splitting de l'ordre annoncé. De plus, les valeurs propres

« correspondant » aux quasimodes ϕ^+ et ϕ^-, sont :

$$\lambda^{\pm} = \mathrm{E} + \text{valeurs propres de } \mathrm{M} + O_\varepsilon(e^{-4\mathrm{R}m_\varepsilon}), \tag{33}$$

où M est la matrice d'interaction 2×2 de coefficients :

$$\begin{pmatrix} ((\mathrm{K}-\mathrm{E})\phi^+ \mid \phi^+) & ((\mathrm{K}-\mathrm{E})\phi^+ \mid \phi^-) \\ ((\mathrm{K}-\mathrm{E})\phi^- \mid \phi^+) & ((\mathrm{K}-\mathrm{E})\phi^- \mid \phi^-) \end{pmatrix}. \tag{34}$$

Les coefficients diagonaux de la matrice d'interaction sont de l'ordre de grandeur de l'erreur, donc le splitting dû à l'effet tunnel est :

$$\Delta\lambda = 2 \left| ((\mathrm{K}-\mathrm{E})\phi^+ \mid \phi^-) \right| + O_\varepsilon(e^{-4\mathrm{R}m_\varepsilon}). \tag{35}$$

On trouve donc facilement une majoration de $\Delta\lambda$ à partir de l'équation (35) mais pour avoir une minoration, il faudrait bien connaître la taille du quasimode.

Pour la première valeur propre, ce n'est pas difficile, parce que l'on peut choisir de prendre ϕ^+ et ϕ^- positifs. On écrit :

$$((\mathrm{K}-\mathrm{E})\phi^+ \mid \phi^-) = (\mathrm{W}(x - \mathrm{R}\vec{e}_1)\phi^+ \mid \phi^-). \tag{36}$$

On peut trouver $w > 0$ et $\delta > 0$ tels que :

$$|x| < \delta \quad \text{implique} \quad \mathrm{W}(x) > w.$$

On en déduit la minoration :

$$((\mathrm{K}-\mathrm{E})\phi^+ \mid \phi^-) \geqq w \int_{|x - \mathrm{R}\vec{e}_1| < \delta} (\phi^+ \mid \phi^-), \tag{37}$$

et la positivité des fonctions propres, ainsi que les estimations (19) permettent de conclure que :

$$((\mathrm{K}-\mathrm{E})\phi^+ \mid \phi^-) \geqq \tilde{\mathrm{C}}_\varepsilon e^{-2\tilde{m}_\varepsilon \mathrm{R}}, \tag{38}$$

quitte à modifier $\tilde{\mathrm{C}}_\varepsilon$.

Pour l'équation de Dirac, on choisit aussi comme potentiel de référence $\mathrm{V} = -1 + \mathrm{W}$, et les quasimodes $\phi_\mathrm{D}(x - \mathrm{R}\vec{e}_1)$ et $\phi_\mathrm{D}(x + \mathrm{R}\vec{e}_1)$ (correspondants à une fonction propre normalisée ϕ_D associée à une valeur propre double E de $\mathrm{D}_{-1+\mathrm{W}}$) ainsi bien sûr que leurs images par l'opérateur de Kramers $\mathscr{K}$. On a alors un espace de dimension 4 qui approche très bien (quand $\mathrm{R} \to \infty$) l'espace propre correspondant aux deux valeurs propres doubles proches de E. L'écart entre les deux valeurs propres est majoré par un terme de l'ordre de $e^{-2\mathrm{R}d_\varepsilon}$ si $-2 < \mathrm{E} < 0$ pour les mêmes raisons que précédemment. Comme pour l'opérateur de Klein-Gordon, on calcule la matrice d'interaction (qui est d'ordre 4). On montrera dans la section 3.1 [*cf.* l'équation (53)] que le calcul de cette matrice d'interaction fait apparaître comme écart entre les deux valeurs propres doubles :

$$\Delta\lambda = \sqrt{\left| ((\mathrm{D}-\mathrm{E})\phi^+ \mid \phi^-) \right|^2 + \left| ((\mathrm{D}-\mathrm{E})\phi^+ \mid \mathscr{K}\phi^-) \right|^2} + O_\varepsilon(e^{-4\mathrm{R}d_\varepsilon}), \tag{39}$$

qu'il s'agit d'estimer et si possible de minorer par un terme de l'ordre de $O(e^{-2Rd_\varepsilon})$.

Nous verrons en appendice que c'est le cas lorsque W est radial [*cf.* (139)]. Comme on sait que pour $|E|>1$:

$$e^{-2Rm_\varepsilon} \ll e^{-2Rd_\varepsilon},$$

le splitting est alors asymptotiquement plus faible quand R tend vers l'infini pour l'opérateur de Klein-Gordon que pour l'opérateur de Dirac lorsque $|E|>1$.

Remarque 2. — Si on ne suppose plus que le potentiel W est à support compact, on doit alors modifier les quasi-modes (essentiellement parce qu'il faut tenir compte dans ϕ^+ du potentiel $W(x-R\vec{e}_1)$ qui ne s'annule plus). Le problème de référence est alors de prendre pour ϕ^+ la première fonction propre normalisée associée à la valeur propre E de l'opérateur :

$$\langle -\Delta \rangle - 1 + W(x+R\vec{e}_1) + W(x-R\vec{e}_1)\,\chi\left(\frac{(x\,|\,\vec{e}_1)}{R}\right), \tag{40}$$

où $\chi(y)$ est une troncature positive définie par

$$\begin{aligned} \chi(y) &= 1 \qquad \text{si} \quad y \leqq \frac{1}{2}, \\ &= 0 \qquad \text{si} \quad y \geqq \frac{3}{4}. \end{aligned} \tag{41}$$

C'est-à-dire que χ « bouche » le puits situé en $x=R\vec{e}_1$. On définit alors ϕ^- de manière symétrique en posant :

$$\phi^-(x'+(x\,.\,\vec{e}_1)\,\vec{e}_1) = \phi^+(x'-(x\,.\,\vec{e}_1)\,\vec{e}_1), \tag{42}$$

où $x'=x-(x\,.\,\vec{e}_1)\,\vec{e}_1$ est la projection orthogonale de x sur l'hyperplan normal à $\vec{e}_1$. On effectue les mêmes constructions pour l'opérateur de Dirac et on s'aperçoit que le splitting entre valeurs propres se calcule encore à l'aide de la matrice d'interaction (avec quasimodes modifiés).

3. QUELQUES RÉSULTATS SEMI-CLASSIQUES

Dans cette section, on donne des résultats sur la décroissance de fonctions propres lorsque le potentiel correspondant n'a qu'un seul puits. On en déduit une majoration ou un équivalent de l'effet tunnel dans le cas du double puits symétrique. On compare enfin le résultat obtenu pour les deux opérateurs suivant les propriétés du potentiel.

3.1. Cas de l'opérateur de Dirac

Rappelons tout d'abord que Wang donne les résultats suivants sur la décroissance des fonctions propres.

Soit W un potentiel tel que $V=W-1$ vérifie les hypothèses (2) et (9 renforcée) c'est-à-dire que :

$$\lim_{|x| \to +\infty} W(x)=0, \qquad E=\min W(x) \in]-2, 0[. \tag{43}$$

Le spectre de D_{-1+W} est alors discret dans l'intervalle $]-2, 0[$. On suppose de plus que le minimum de W est atteint en un point unique que l'on choisira comme origine. Le [23], Lemme 2.3, peut s'énoncer ainsi :

LEMME 2. — *Soit u_h une suite de fonctions propres normalisées correspondant à une suite de valeurs propres μ_h tendant vers* E *lorsque h tend vers* 0. *On définit la métrique d'Agmon par :*

$$(1-(V(x)-E)^2)\,dx^2.$$

Soit $d(x)$ la distance d'Agmon du point x au puits (l'origine). Soit K *un compact. Alors on a :*

$$|e^{d(x)/h} u_h|_{L^2(K)} + |e^{d(x)/h} \nabla u_h|_{L^2(K)} \leqq C_{\varepsilon, K}\, e^{\varepsilon/h} \tag{44}$$

Si on suppose de plus que le puits ponctuel est non dégénéré :

$$W''(0) >> 0, \tag{45}$$

alors on peut montrer l'inégalité ([23], (2.39)) :

$$|e^{d(x)/h} u_h|_{L^2(K)} + h\,|e^{d(x)/h} \nabla u_h|_{L^2(K)} \leqq C_K\, h^{-D}. \tag{46}$$

L'hypothèse (45) n'est pas nécessaire pour majorer l'effet tunnel mais nous sera indispensable pour le minorer.

Écrivons le développement de Taylor de W en 0 :

$$W(x)=\left(E+\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3} \Lambda_j^2 x_j^2\right)+o(x^2), \qquad \Lambda_j>0. \tag{47}$$

On peut alors appliquer le ([23], Théorème 3.6]) de Wang :

Fixons $C>0$. Pour h assez petit, le spectre de $D_{-1+W}(h)$ dans l'intervalle $[E-Ch, E+Ch]$ est constitué de valeurs propres doubles en bijection avec l'ensemble des :

$$\{e_\alpha=E+\mu_\alpha h\},$$

où

$$\mu_\alpha=\sum_{j=1}^{3} \Lambda_j\left(\alpha_j+\frac{1}{2}\right), \quad \alpha \in \mathbb{N}^3, \quad \text{avec } \mu_\alpha<C.$$

Cette bijection vérifie :

$$b(\mu)-\mu=O(h^{3/2}).$$

Dans la suite de cette section, on reprend le cas du double-puits étudié par Wang dans [23], Théorème 6.4 ([3]) et on le précise. On notera dorénavant K au lieu de $\mathscr{K}$ l'opérateur de Kramers.

Définissons maintenant le double puits symétrique. Soit $\vec{e}_1=(e_{1,1}, e_{1,2}, e_{1,3})\in\mathbb{R}^3$ et V le potentiel défini par :

$$\mathrm{V}(x)=-1+\mathrm{W}(x+\vec{e}_1)+\mathrm{W}(x-\vec{e}_1) \tag{48}$$

Les problèmes de référence associés à chaque puits s'obtiennent en rajoutant à V une fonction à support près du puits symétrique de celui étudié. Soit $\tilde{\mathrm{W}}\in\mathrm{C}_0^\infty(\{|x|<\varepsilon\}, \mathbb{R}^+)$, telle que $\tilde{\mathrm{W}}(x)>\varepsilon$ si $|x|<\varepsilon/2$. On pose alors :

$$\mathrm{V}^{\pm}(x)=\mathrm{V}(x)+\tilde{\mathrm{W}}(x\mp\vec{e}_1). \tag{49}$$

Les opérateurs $\mathrm{D}_{\mathrm{V}^\pm}(h)$ admettent exactement n valeurs propres doubles dans l'intervalle $[e_\alpha-\mathrm{D}h^{3/2}, e_\alpha+\mathrm{D}h^{3/2}]$, où n est le nombre de triplets α auxquels correspond le même e_α. Un autre théorème de Wang ([23], Théorème 2.7) montre alors que l'opérateur $\mathrm{D}_\mathrm{V}(h)$ admet exactement $2n$ valeurs propres doubles dans l'intervalle $[e_\alpha-\mathrm{D}h^{3/2}, e_\alpha+\mathrm{D}h^{3/2}]$. Soit S la distance d'Agmon [associée à la métrique $(1-(\mathrm{V}(x)-\mathrm{E})^2)_+\,dx^2$] entre les deux puits $\vec{e}_1$ et $-\vec{e}_1$. Soit (λ_k) la suite croissante des valeurs propres doubles de $\mathrm{D}_{\mathrm{V}^\pm}$ (ces deux opérateurs sont isospectraux à cause de la symétrie). Alors les valeurs propres doubles de $\mathrm{D}_\mathrm{V}(h)$ forment une suite croissante $(\lambda_{k,-}, \lambda_{k,+})$ telle que :

$$\lambda_{k,\pm}-\lambda_k=\tilde{O}(e^{-\mathrm{S}/h}), \tag{50}$$

où la notation $\tilde{O}$ signifie que pour tout $\varepsilon>0$, il existe C_ε tel que

$$|\lambda_{k,\pm}-\lambda_k|\leqq \mathrm{C}_\varepsilon(e^{-(\mathrm{S}-\varepsilon)/h}).$$

On peut préciser $\lambda_{k,\pm}-\lambda_k$ en calculant la matrice d'interaction, ce qui réduit le terme d'erreur à un $\tilde{O}(e^{-2\mathrm{S}/h})$. C'est ce que nous allons faire dans le cas de la première valeur propre λ_0 correspondant à e_0 ($\alpha=(0, 0, 0)$).

Notons $u^\pm$ et $\mathrm{K}u^\pm$ deux vecteurs propres normés correspondants à la valeur propre $\lambda_0=e_0+O(h^{3/2})$ de $\mathrm{D}_{\mathrm{V}^\pm}$. Remarquons que $u^\pm$ et $\mathrm{K}u^\pm$ sont localisées près de $\mp\vec{e}_1$. On posera encore :

$$u_1=u^+,\qquad u_2=\mathrm{K}u^+,\qquad u_3=u^-,\qquad u_4=\mathrm{K}u^- \tag{51}$$

La décroissance des fonctions propres permet de montrer que :

$$(\mathrm{D}_\mathrm{V}-\lambda_0)\,u^+=\tilde{O}(e^{-\mathrm{S}/h}),$$

et de même pour $\mathrm{K}u^\pm$ et u^-. L'application de la Proposition 2.5 de [12] et du théorème de Pythagore montre alors que les valeurs propres de D_V

([3]) On pourra aussi consulter le Théorème 6.2 de la thèse de Wang ([24], p. 70).

sont les valeurs propres de la matrice $M+\lambda_0 . I_4$ à une erreur d'ordre $\tilde{O}(e^{-2S/h})$ près, où la matrice d'interaction M a comme coefficients :

$$M=(m_{ij})_{1 \leq i, j \leq 4}, \qquad m_{ij}=((D_V-\lambda_0)\, u_i \,|\, u_j). \tag{52}$$

On notera « $\equiv$ » lorsque deux quantités ne diffèrent que de l'ordre de $\tilde{O}(e^{-2S/h})$. La matrice M prend alors la forme :

$$M \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{\delta} & \bar{\varepsilon} \\ 0 & 0 & -\varepsilon & \delta \\ \delta & -\bar{\varepsilon} & 0 & 0 \\ \varepsilon & \bar{\delta} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{53}$$

Les valeurs propres d'une telle matrice sont données par :

$$M \text{ a pour valeurs propres} \pm \Delta, \qquad \Delta=\sqrt{|\delta|^2+|\varepsilon|^2}\,(h) \tag{54}$$

Nous verrons que, sous une hypothèse géométrique (existence d'une unique géodésique minimale reliant les deux puits symétriques), on peut alors montrer que :

$$\Delta=C\sqrt{h}\,(1+O(h))\, e^{-S/h}, \qquad C>0. \tag{55}$$

Remarquons encore que la forme de la matrice M ne dépend pas de l'hypothèse de non-dégénérescence (47) de W mais que le résultat $C>0$ en dépend fortement.

Preuve de (53). – • Tout d'abord la décroissance des fonctions propres montre immédiatement que les termes diagonaux de M sont de l'ordre de grandeur de l'erreur.

• En utilisant successivement que $(u \,|\, K v)=-(v \,|\, K u)$, K commute avec D, D est auto-adjoint, on obtient :

$$\begin{aligned} ((D-\lambda_0)\, u^+ \,|\, K u^+) &= -(u^+ \,|\, K(D-\lambda_0)\, u^+) \\ &= -(u^+ \,|\, (D-\lambda_0) K u^+) \\ &= -((D-\lambda_0)\, u^+ \,|\, K u^+) \end{aligned}$$

On en déduit que $m_{12}=0$. De même pour m_{21}, m_{34}, m_{43}.

• De plus, on a :

$$m_{14}=((D-\lambda_0)\, u^+ \,|\, K u^-)=-(u^- \,|\, K(D-\lambda_0)\, u^+)=-((D-\lambda_0)\, u^- \,|\, K u^+)$$

donc $m_{32}=-m_{14}$. Enfin :

$$m_{14}=((D-\lambda_0)\, u^+ \,|\, K u^-)=\overline{(K u^- \,|\, (D-\lambda_0)\, u^+)}=\overline{((D-\lambda_0) K u^- \,|\, u^+)}$$

donc $m_{14}=-\overline{m_{14}}$. De même, $m_{32}=\overline{m_{23}}$.

On a des résultats analogues pour les δ.

Nous avons donc établi la forme de M.

Preuve de (54). – On s'aperçoit que :

$$M^2=(|\delta|^2+|\varepsilon|^2) . I_4=\Delta^2 . I_4. \tag{56}$$

On en déduit que M est diagonalisable de valeurs propres doubles $\pm\sqrt{|\delta|^2+|\varepsilon|^2}$. (Chacune des valeurs propres est double parce que la trace de M est nulle).

Il nous reste à estimer Δ. Il s'agit donc de calculer $((D-\lambda_0)u^+ \mid u^-)$ et $((D-\lambda_0)u^+ \mid K u^-)$.

Le calcul se fait de la même manière dans les deux cas et consiste à découper $\mathbb{R}^3$ en deux demi-espaces suivant le signe de $x.\vec{e}_1$. Comme V et V^+ coïncident sur $\{x/x.\vec{e}_1<0\}$, le morceau d'intégrale calculé sur cet ensemble est nul (car u^+ est vecteur propre de D_{V^+}).

Si on veut appliquer le même raisonnement à l'ensemble $\{x/x.\vec{e}_1>0\}$ mais pour V^- et u^-, il faut au préalable faire une intégration par parties (formule de Stokes) pour changer de côté l'opérateur D_V (on utilise aussi que D_V est formellement auto-adjoint).

Il ne reste donc qu'une intégrale de surface :

$$-\frac{h}{i}\iint_{x\,.\,\vec{e}_1=0}\left(\frac{\vec{e}_1\,.\,\alpha}{|\vec{e}_1|}u^+ \mid u^-\right), \tag{57}$$

où $\vec{e}_1\,.\,\alpha=\sum_{j=1}^{3} e_{1,j}\alpha_j$.

Pour fixer les idées, supposons que $\vec{e}_1\,.\,\alpha=\alpha_1$ ce qui ne change rien à la généralité.

Pour estimer cette intégrale de surface (57), il nous faut une hypothèse sur le minimum de la distance d'Agmon entre les deux puits symétriques. On suppose donc que ce minimum est réalisé par une unique géodésique minimale non dégénérée (en un sens défini ci-dessous).

Soit x_0 le point de la géodésique situé dans l'hyperplan de symétrie d'équation $x_0.\vec{e}_1=0$. On sait par la construction BKW ([23], section 4 et [17], section 2) que l'on peut remplacer les fonctions propres u^+ (ou Ku^+) et u^- (ou Ku^-) au voisinage d'une géodésique minimale issue de leur puits respectif par des fonctions BKW de la forme :

$$h^{-3/4}\left(\sum_{j=0}^{\infty} h^j u_{\pm,j}\right)e^{-d^{\pm}(x)/h},$$

où $d^{\pm}(x)$ est la distance d'Agmon du puits $\pm\vec{e}_1$ au point x. L'erreur commise est un terme d'ordre $O(h^\infty)e^{-d(x)/h}$.

Sur la surface $x.\vec{e}_1=0$, le minimum de $d(x)$ est atteint pour $x=x_0$ et ce minimum vaut $\frac{S}{2}$. Le remplacement des fonctions propres par les fonctions BKW crée donc une erreur de l'ordre de $O(h^\infty)e^{-S/h}$.

Pour continuer, il faut supposer que la somme $f(x)=d(x,\vec{e}_1)+d(x,-\vec{e}_1)|_{x\,.\,\vec{e}_1=0}$ qui apparaît dans l'exposant vérifie les hypothèses du théorème de la phase stationnaire en x_0 (dans l'hypersurface $x.\vec{e}_1=0$).

On suppose donc que :

$$A = f''|_{x.\vec{e}_1=0}(x_0) \text{ est non dégénéré.} \tag{58}$$

On applique alors le lemme de la phase stationnaire, et on en déduit que :

$$\varepsilon = \beta(1+O(h))\frac{\sqrt{h}}{2\pi\sqrt{|\det A|}}(\alpha_1 u_{+,0}(x_0) \,|\, u_{-,0}(x_0)), \tag{59}$$

$$\delta = i(1+O(h))\frac{\sqrt{h}}{2\pi\sqrt{|\det A|}}(\alpha_1 u_{+,0}(x_0) \,|\, K u_{-,0}(x_0)),$$

où β est un nombre complexe de module 1. Rappelons que c'est $\Delta = \sqrt{|\delta|^2 + /\varepsilon|^2}$ qui nous intéresse, par conséquent le calcul de β importe peu.

On utilise ici des résultats de [18], section 4.1. Si on note :

$$\begin{aligned} P_V^+(x) &= i\nabla d(x, -\vec{e}_1).\alpha + \alpha_4 + (V(x)-E).I_4, \\ P_V^-(x) &= i\nabla d(x, +\vec{e}_1).\alpha + \alpha_4 + (V(x)-E).I_4, \end{aligned} \tag{60}$$

alors en écrivant $e^{d(x)/h}(D_V - E)(u_{\pm,0}e^{-d/h}) = O(h)$, on montre facilement que :

$$u_{\pm,0}, K u_{\pm,0} \in \operatorname{Ker} P_V^{\pm}.$$

(Les noyaux sont non vides, car la distance d'Agmon vérifie l'équation eïconale, on montre qu'ils sont en fait de dimension 2). On en déduit que $(u_{-,0}(x_0), K u_{-,0}(x_0))$ est une base orthogonale de $\operatorname{Ker} P_V^-$. Pour calculer Δ, il nous reste à calculer la projection sur $\operatorname{Ker} P_V^-$ de $\alpha_1 u_{+,0}$ en x_0 (en se rappelant que $u_{+,0}$ appartient à $\operatorname{Ker} P_V^+$). On montre que le projecteur sur $\operatorname{Ker} P_V^-$ est donné par :

$$\pi = \frac{1}{2} P_{-V}^- \alpha_4,$$

où $P_{-V}^- = i\nabla d(x, -\vec{e}_1).\alpha + \alpha_4 - (V(x)-E).I_4$.
Si on se souvient que :

$$\nabla d(x_0, \vec{e}_1) = -\nabla d(x_0, -\vec{e}_1) = -\sqrt{1-(V-E)^2}\,\vec{e}_1,$$

on en déduit que :

$$\pi\alpha_1 u_{+,0}(x_0) = -i\alpha_4\sqrt{1-(V-E)^2}\,u_{+,0}(x_0).$$

Finalement, on trouve :

$$\Delta = \frac{\sqrt{h}}{2\pi\sqrt{|\det A|}}\sqrt{1-(V-E)^2}\,|u_{+,0}|\,|u_{-,0}|(x_0)(1+O(h)).$$

Le fait que la constante C soit strictement positive est une conséquence du fait que la norme de $u_{\pm,0}$ ne s'annule pas. On peut d'ailleurs calculer cette norme à l'aide de l'équation de transport et (du fait que les fonctions propres sont normées) en déduire le :

THÉORÈME 3. — *Soit* V *un potentiel de la forme* (48) *admettant deux puits symétriques ponctuels en* $\vec{e}_1$ *et* $-\vec{e}_1$. *Soit* $\mathrm{E}=\mathrm{V}(\vec{e}_1)+1<0$. *On suppose que* $\mathrm{V}(.-\vec{e}_1)+1$ *prend la forme* (47) *au voisinage de* $x=\vec{e}_1$ (*les puits sont non dégénérés*).

On suppose qu'il existe une unique géodésique minimale (*pour la distance d'Agmon* d) *reliant ces deux puits. Soit* x_0 *le point de cette géodésique tel que* $x_0 . \vec{e}_1=0$ *et* $f(x)=d(x, \vec{e}_1)+d(x, -\vec{e}_1)|_{x . \vec{e}_1=0}$. *On suppose que* f *admet un minimum* S *non dégénéré en* x_0.

Pour h *assez petit, il existe alors deux valeurs propres doubles dans l'intervalle* $\{\mathrm{E}+h\sum_j \Lambda_j\}+\mathrm{D}h^{3/2}$. *L'écart entre ces deux valeurs propres doubles est donné par :*

$$\lambda_{0,+}-\lambda_{0,-}=\sqrt{\frac{2\pi\prod\Lambda_j(1-(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2)(x_0)}{|\det f''(x_0)|}}$$
$$\times e^{-2\int_0^t ((\mathrm{V}-\mathrm{E})\Sigma_j\Lambda_j+\Delta d)/\sqrt{1-(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2}(\gamma(s))\,ds}\, e^{-\mathrm{S}/h}\sqrt{h}\,(1+O(h)), \qquad (61)$$

où l'on paramètre la géodésique γ *reliant* $\vec{e}_1$ *à* x_0 *à l'aide de la distance curviligne* (*pour la métrique euclidienne*) *de telle sorte que* $\gamma(t)=x_0$.

3.2. Cas de l'opérateur de Klein-Gordon

On commence par donner des estimations de décroissance pour les fonctions propres, puis on esquisse la construction BKW et on termine par le calcul de l'effet tunnel.

3.2.1. Estimations de décroissance des fonctions propres

En s'inspirant très fortement de la méthode utilisée dans [9], nous allons obtenir des estimations de décroissance pour l'opérateur de Klein-Gordon analogues à celles obtenues pour l'opérateur de Dirac [équations (44) et (46)].

On reprend pour le potentiel $\mathrm{V}=-1+\mathrm{W}$ la même hypothèse (43) qu'à la section 3.1 et on suppose que le minimum E de W est atteint en un point unique que l'on prend comme origine. (Ici, il n'est pas nécessaire de supposer que $\mathrm{E}>-2$.)

Soit u_h une suite de fonctions propres de l'opérateur K associée à une suite de fonctions propres μ_h tendant vers la limite $\mathrm{E}=\min \mathrm{W}(x)$.

On construit d'abord une famille de fonctions de troncatures χ_ε pour « combler le puits » et une famille de phases Ψ_ε proches de la distance d'Agmon d (associée à la métrique $(1-(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2)\,dx^2$ si $\mathrm{V}<\mathrm{E}$ et à la métrique euclidienne dx^2 si $V \geqq E$) :

- Soit $\chi \in C_0^\infty(|x|<2; \mathbb{R}^+)$ telle que $\chi(x)=1$ si $|x|<1$. On pose :

$$\chi_\varepsilon = \chi\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \in C_0^\infty(|x|<2\varepsilon; \mathbb{R}^+). \tag{62}$$

- Soit $\phi_\varepsilon(x)=(1-\varepsilon/2)\,d(x)$ et Ψ_ε une régularisée de ϕ_ε telle que :

– $\Psi_\varepsilon(0)=0$,

– Ψ_ε est constante loin d'un compact où on s'intéresse à la décroissance de u_h,

– Si $V(x)<E$,

$$|\nabla \Psi_\varepsilon|^2 \leqq (1-\varepsilon)^2 (1-(V(x)-E)^2), \tag{63}$$

et si $V(x) \geqq E$,

$$|\nabla \Psi_\varepsilon|^2 \leqq (1-\varepsilon)^2. \tag{64}$$

Soit :

$$v_\varepsilon = e^{\Psi_\varepsilon/h} u_h.$$

Il suffira de prouver que :

$$v_\varepsilon = O(e^{C\varepsilon/h}), \tag{65}$$

et on en déduira facilement l'équivalent de (44).

Soit P_{V_ε} l'opérateur de Klein-Gordon de potentiel :

$$V_\varepsilon = V + \chi_\varepsilon,$$

et notons :

$$P^\varepsilon = e^{\Psi_\varepsilon/h} P_{V_\varepsilon} e^{-\Psi_\varepsilon/h}.$$

Nous allons montrer que $(P^\varepsilon - \mu_h)\, v_\varepsilon = O(e^{C\varepsilon/h})$ et que $P^\varepsilon - \mu_h$ est une famille uniformément [4] inversible d'opérateurs (pour h assez petit). On en déduira (65).

Étude de $(P^\varepsilon - \mu_h)\, v_\varepsilon$

Par définition, on a :

$$\begin{aligned} P^\varepsilon v_\varepsilon &= (e^{\phi_\varepsilon/h} P_{V_\varepsilon} e^{-\phi_\varepsilon/h})(e^{\phi_\varepsilon/h} u_h) \\ &= e^{\phi_\varepsilon/h} P_{V_\varepsilon} u_h \\ &= e^{\phi_\varepsilon/h} (P_V + \chi_\varepsilon)\, u_h \\ &= \mu_h e^{\phi_\varepsilon/h} u_h + \chi_\varepsilon e^{\phi_\varepsilon/h} u_h \\ &= \mu_h v_\varepsilon + \chi_\varepsilon e^{\phi_\varepsilon/h} u_h. \end{aligned}$$

---

[4] Par rapport à h.

Donc :

$$(\mathrm{P}^{\varepsilon}-\mu_h)\, v_{\varepsilon}=\chi_{\varepsilon}\, e^{\phi_{\varepsilon}/h}\, u_h,$$

et, comme le support de χ_{ε} est inclus dans la boule de rayon 2ε [*cf.* (62)], on en tire :

$$|(\mathrm{P}^{\varepsilon}-\mu_h)\, v_{\varepsilon}|=O\,(e^{\mathrm{C}\varepsilon/h}). \tag{66}$$

Uniforme inversibilité

On remarque que $\mathrm{P}^{\varepsilon}-\mathrm{E}$ est une famille d'opérateurs pseudo-différentiels dont le symbole principal est donné par :

$$p_0^{\varepsilon}(x,\, \xi)-\mathrm{E}=\sqrt{1+(\xi+i\nabla\Psi_{\varepsilon})^2}+\mathrm{V}-\mathrm{E}+\chi_{\varepsilon}. \tag{67}$$

Il s'agit de montrer que $p_0^{\varepsilon}-\mathrm{E}$ est uniformément elliptique.

On part de l'inégalité :

$$\Re\sqrt{x+iy}\geqq\sqrt{x}, \qquad x\in\mathbb{R}^+, \quad y\in\mathbb{R}. \tag{68}$$

La preuve de (68) consiste à poser :

$$a+ib=\sqrt{x+iy}, \qquad a\in\mathbb{R}^+, \quad b\in\mathbb{R},$$

à prendre les carrés :

$$x=a^2-b^2, \qquad y=2\,ab,$$

et à s'apercevoir que (68) devient :

$$a\geqq\sqrt{a^2-b^2}$$

qui est trivial.

Il s'agit donc de minorer uniformément en $(x,\, \xi)$:

$$\sqrt{1+\xi^2-|\nabla\Psi_{\varepsilon}|^2}+\mathrm{V}\,(x)-\mathrm{E}+\chi_{\varepsilon}\,(x).$$

Traitons tout d'abord le cas $\mathrm{V}\,(x)\geqq\mathrm{E}$. L'équation (64) entraîne alors que :

$$1-|\nabla\Psi_{\varepsilon}|^2\geqq 1-(1-\varepsilon)^2=2\,\varepsilon-\varepsilon^2\geqq\varepsilon,$$

donc :

$$\Re\, p_0^{\varepsilon}-\mathrm{E}\geqq\sqrt{\varepsilon}+\mathrm{V}-\mathrm{E}\geqq\sqrt{\varepsilon}.$$

On suppose maintenant que $\mathrm{V}<\mathrm{E}$. Alors, on a :

$$\begin{aligned}1-|\nabla\Psi_{\varepsilon}|^2&\geqq 1-(1-\varepsilon)^2\,(1-(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2)\\&\geqq(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2+(2\,\varepsilon-\varepsilon^2)\,(1-(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2)\\&\geqq(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2+\varepsilon\,(1-(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2).\end{aligned}$$

On découpe en deux régions :

• Si $|x|<\varepsilon$.

On minore $(V-E)^2+\varepsilon(1-(V-E)^2)$ par $(E-V)^2$. Rappelons que $E-V>0$ et que $\chi_\varepsilon=1$ donc :

$$\Re p_0^\varepsilon - E \geqq \sqrt{(E-V)^2}+V-E+1=1.$$

• Si $|x|>\varepsilon$.

Il existe alors une fonction $f \in \mathscr{F}(\mathbb{R}_*^+, \mathbb{R}_*^+)$ telle que $|V(x)-E+1|>f(\varepsilon)$, donc :

$$1-(V-E)^2=(1+(V-E))(1-(V-E))>(1+(V-E))>f(\varepsilon),$$

et :

$$\Re p_0^\varepsilon - E \geqq \sqrt{(E-V)^2+\varepsilon f(\varepsilon)}+V-E.$$

Pour ε assez petit, on a alors (quitte à diminuer f) :

$$\Re p_0^\varepsilon - E \geqq E-V+f(\varepsilon)\varepsilon^2+V-E.$$

Donc $p_0^\varepsilon - E$ est uniformément elliptique. On en déduit que $P^\varepsilon - E$ est uniformément inversible pour h assez petit, il en est donc de même de l'opérateur $P^\varepsilon - \mu_h$ puisque $\mu_h \to E$:

$$|(P^\varepsilon-\mu_h)^{-1}| \leqq C_\varepsilon. \tag{69}$$

Comme suggéré plus haut, on combine (66) avec cette équation et on obtient (en choisissant bien la régularisée Ψ_ε) le :

LEMME 4. — *Soit* u_h *une suite de fonctions propres normalisées associée à une suite de valeurs propres* μ_h *de l'opérateur de Klein-Gordon avec potentiel* $V=-1+W$ *vérifiant* (43) *et atteignant son minimum en un point unique pris comme origine. Alors pour tout* $\varepsilon>0$ *et tout compact* $\mathscr{K}$, *il existe une constante* $C_{\varepsilon,\mathscr{K}}$ *telle que, pour h assez petit, on ait :*

$$|e^{d(x)/h} u_h| \leqq C_{\varepsilon,\mathscr{K}}\, e^{\varepsilon/h}, \tag{70}$$

où $x \to d(x)$ *désigne la distance d'Agmon du point x à l'origine* [*associée à la métrique* $(1-(V-E)^2)\,dx^2$ *si* $V<E$ *et à la métrique euclidienne si* $V \geqq E$].

De plus, dans le cas d'un minimum non dégénéré atteint en un seul point (pris comme origine), on peut améliorer l'estimation (70) comme dans [12] :

THÉORÈME 5. — *Il existe un entier* N *tel que pour tout compact* $\mathscr{K}$ *de* $\mathbb{R}^3$, *il existe une constante* $C_{\mathscr{K}}$ *telle que la première fonction propre normalisée* (*correspondant à la première valeur propre de l'opérateur de Klein-Gordon*) *vérifie :*

$$|\phi_K(x,h)| \leqq C_{\mathscr{K}}\, h^{-N} e^{-d(x)/h}, \tag{71}$$

où $d(x)$ désigne la distance d'Agmon du point x à l'origine [*associée à la métrique* $(1-(\mathrm{V}-\mathrm{E})^2)\,dx^2$ *si* $\mathrm{V}<\mathrm{E}=\min \mathrm{V}+1$ *et à la métrique euclidienne si* $\mathrm{V} \geqq \mathrm{E}$].

Preuve. — Il suffit d'adapter la preuve de [9] à l'opérateur de Klein-Gordon. Le théorème 5 est encore vrai pour des fonctions propres correspondant à une famille de valeurs propres μ_h telle que $|\mu_h - \mathrm{E}| \leqq \mathrm{C}\,h$ lorsque $h \to 0$.

3.2.2. Construction *BKW* pour l'opérateur de Klein-Gordon

Dans la région où $\mathrm{V}(x)<\min \mathrm{V}+1$, il n'y a pas de différence essentielle avec la construction de solutions *BKW* pour l'opérateur de Schrödinger faite dans [12].

La phase satisfait l'équation eïconale :

$$\sqrt{1-|\nabla d|^2}+\mathrm{V}(x)=\min \mathrm{V}+1, \tag{72}$$

que l'on peut résoudre le long des géodésiques minimales issues du puits. Nous ne donnons pas de détails puisque l'étude dans la région $\mathrm{V}(x)<\min \mathrm{V}+1$ est essentiellement la même que celle faite dans [12].

Les estimations *a priori* de décroissance exponentielle (71) des fonctions propres sont ici optimales.

Par contre, dès qu'on pénètre dans la région où $\mathrm{V} \geqq \min \mathrm{V}+1$, plus rien n'est clair et les seuls résultats positifs sont ceux de Carmona, Masters et Simon. Il paraît impossible d'effectuer des constructions *BKW* classiques. Comme le suggère A. Grigis, on peut peut-être effectuer dans cette région des constructions analogues à celles que l'on effectue lorsque l'on passe à travers un point tournant simple.

3.2.3. Effet tunnel pour des opérateurs pseudo-différentiels

On traitera en détail le cas de l'opérateur de Klein-Gordon, mais la méthode présentée dans cette section s'adapte à des familles d'opérateurs pseudo-différentiels dont le symbole se prolonge analytiquement en ξ dans une bande du plan complexe ($|\Im \xi| \leqq \mathrm{C}$).

On considère donc l'opérateur de Klein-Gordon défini sur $\mathbb{R}^n$ ($n=3$ nous intéresse plus particulièrement) par (1).

Nous faisons les hypothèses suivantes sur le potentiel V :

- $\mathrm{V}(x)$ est un potentiel C^∞ (comme le potentiel disparaît dans les expressions que l'on évaluera, il n'est pas nécessaire de le supposer analytique si l'on ne désire pas faire du *BKW* analytique),
- $\lim_{|x| \to \infty} \mathrm{V}(x) = -1$,
- $\forall \alpha \in \mathbb{N}^n$, $|\mathrm{D}_x^\alpha \mathrm{V}| \leqq \mathrm{C}_\alpha$,

• V est symétrique par rapport à l'hyperplan $x_n = 0$:

$$V(x', -x_n) = V(x', x_n), \tag{73}$$

• V possède deux minima non dégénérés aux points $\pm x_0$, $(x_0)_n = c > 0$, tels que :

$$V(-x_0)\,(=V(x_0)) < -1 \tag{74}$$

Comme pour l'opérateur de Schrödinger, l'écart entre les deux premières valeurs propres s'obtient par le calcul de la matrice d'interaction 2×2. Cette matrice est la matrice de l'opérateur de Klein-Gordon restreint à l'espace spectral engendré par les deux premières fonctions propres, matrice écrite dans une base bien choisie de cet espace spectral.

Dans le cas de l'opérateur de Schrödinger (ou Dirac), on introduisait une troncature χ telle que :

$$\chi = 0 \text{ près de } -x_0, \qquad \chi = 1 \text{ près de } x_0,$$

et l'écart entre les deux premières valeurs propres était donné par :

$$([P, \chi]\, u^g \,|\, u^d). \tag{75}$$

Ici u^g désigne la fonction propre normalisée correspondant à la valeur propre λ^g du problème à un puits (le *g*auche) obtenu en « bouchant » le puits droit :

$$\left.\begin{array}{l} (P + \theta(x))\, u^g = \lambda^g u^g, \qquad \theta(x_0) > 0, \qquad \theta \geqq 0, \\ \operatorname{supp} \theta \subset U, \qquad U \text{ voisinage de } x_0, U \subset \{x_n > 0\}, \end{array}\right\} \tag{76}$$

alors que u^d est obtenu en bouchant le puits gauche. On a d'ailleurs $\lambda^d = \lambda^g$ et $u^d(x', x^n) = u^g(x', -x_n)$ si on « bouche » les puits de façon symétrique.

Revenons à l'opérateur de Klein-Gordon.

Les résultats de décroissance de la section 3.2.1. permettent de prouver que l'écart est donné par :

$$((P - \lambda^d)\, u^g \,|\, u^d) = \int \theta\, u^g\, u^d\, dx, \tag{77}$$

modulo une erreur d'ordre $O(e^{-(S+\varepsilon)/h})$, où ε est strictement positif et où S désigne la distance d'Agmon entre les deux puits x_0 et $-x_0$.

Soit alors χ une troncature valant 1 sur un voisinage du support de θ et 0 sur un voisinage du support de la fonction $\tilde{\theta}$, symétrique de θ :

$$\tilde{\theta}(x', -x_n) = \theta(x', x_n). \tag{78}$$

L'équation (77) peut alors se réécrire :

$$\begin{aligned} ((P - \lambda^d)\, u^g \,|\, u^d) &= (\chi\, (P - \lambda^d)\, u^g \,|\, u^d) \\ &= ([\chi, P]\, u^g \,|\, u^d) + ((P - \lambda^d)\, \chi\, u^g \,|\, u^d) \\ &= ([\chi, P]\, u^g \,|\, u^d) + (\chi\, u^g \,|\, \tilde{\theta}\, u^d) \\ &= ([\chi, P]\, u^g \,|\, u^d). \end{aligned}$$

D'où l'expression donnée en (75).

Dans le cas de Schrödinger, on calculait alors explicitement $[P, \chi]$ et à l'aide de la formule de Green-Riemann, on en déduisait des formules asymptotiques pour l'écart entre les deux premières valeurs propres. Cette méthode paraît inapplicable ici, car il n'y a pas d'équivalent agréable à la formule de Green-Riemann pour un opérateur non différentiel.

C'est la raison pour laquelle nous procédons différemment, comme dans [13]. (En dimension 1, une autre approche du problème est traitée dans [1].)

Soit donc $C_0 > 0$ et soit π_s l'opérateur de multiplication par :

$$C_1 \frac{1}{\sqrt{h}} e^{(i/4h)\,\phi_s(x_n)}, \qquad \phi_s(x_n) = \phi_0(x_n - s), \qquad \phi_0(t) = i\,C_0\,t^2. \tag{79}$$

Remarquons que l'on peut choisir $C_0 = 1$, mais nous préférons conserver C_0, les résultats devront bien sûr être indépendants de C_0. La constante C_1 est déterminée par la condition de normalisation :

$$\int \pi_s\,ds = 1, \quad \text{d'où } C_1 = \sqrt{\frac{C_0}{8\pi}}. \tag{80}$$

Tout d'abord, nous remplaçons $\chi(x)$ par $\int \chi(s)\,\pi_s\,ds$. Il n'est alors plus nécessaire de choisir une troncature χ régulière. Nous prendrons néanmoins une troncature χ à support compact, contenue dans L^∞, valant 1 près de la projection sur x_n du support de θ, et valant 0 près de la projection du support de $\tilde{\theta}$ [définie en (78)].

Si l'on s'inspire des arguments développés ci-dessus, il nous faut d'abord estimer :

$$\iint (1 - \chi(s))\,\pi_s\,\theta\,u^g\,u^d\,dx\,ds$$

et montrer que cette expression est un $O(e^{-(S+\varepsilon_0)/h})$ pour un $\varepsilon_0 > 0$. (Remarquons que dans la suite de la discussion, on diminuera un nombre fini de fois la valeur de ε_0.)

Pour cela, on observe simplement que $(1 - \chi(s))\,\pi_s\,\theta$ est un $O(e^{-\varepsilon_0/h})$ et on utilise les propriétés de décroissance de u^d et u^g.

De même, on s'aperçoit que :

$$\iint \chi(s)\,\pi_s\,\tilde{\theta}\,u^g\,u^d\,dx\,ds = O(e^{-(S+\varepsilon_0)/h}),$$

pour un $\varepsilon_0 > 0$.

Nous sommes maintenant ramenés à l'étude de l'intégrale :

$$\int \chi(s)\,[\mathrm{P},\,\pi_s]\,u^g \,|\, u^d)\,ds, \tag{81}$$

où P est notre opérateur de Klein-Gordon, mais ce qui sera fondamental dans la discussion qui va suivre sera le fait que P est un opérateur pseudo-différentiel dont le symbole est holomorphe dans une bande $|\Im\xi|\leqq C$ de $\mathbb{C}^n$ (pour Klein-Gordon, on a $C=1$).

Introduisons les espaces :

$$\mathrm{H}^1_\phi=\mathrm{H}^1(\mathbb{R}^n,\,e^{-\phi/h}),\qquad \mathrm{L}^2_\phi=\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n,\,e^{-\phi/h}).$$

Nous allons prouver que, modulo une petite erreur, $[\mathrm{P},\,\pi_s]$ peut s'écrire comme $\partial_s \mathrm{Q}_s$, où Q_s est un opérateur à construire. Par petite erreur, nous entendons ici un opérateur R_s dont la norme dans $\mathscr{L}(\mathrm{H}^1_\phi,\,\mathrm{L}^2_\phi)$ est un $O(e^{-\varepsilon_0/h})$ pour tous les ϕ mesurant la décroissance exponentielle de u^g ou u^d (avec le même $\varepsilon_0>0$).

Tout d'abord, nous avons :

$$\mathrm{P}\,\pi_s\,u(x)=\mathrm{C}_1\,(2\pi)^{-n/2}\,h^{-(n+(1/2))}\iint e^{(i/h)\,((x-y)\,\nu+\phi_s(y_n))}\,p\left(\frac{x+y}{2},\,\nu\right)u(y)\,dy\,d\nu \tag{82}$$

$$\pi_s\,\mathrm{P}\,u(x)=\mathrm{C}_1\,(2\pi)^{-n/2}\,h^{-(n+(1/2))}\iint e^{(i/h)\,((x-y)\,\nu+\phi_s(x_n))}\,p\left(\frac{x+y}{2},\,\nu\right)u(y)\,dy\,d\nu \tag{83}$$

On souhaite maintenant écrire les deux opérateurs avec la même phase. On a :

$$(x-y)\,\nu+\phi_s(y_n)=(x-y)\,\nu_+ +\frac{\phi_s(y_n)+\phi_s(x_n)}{2} \tag{84}$$

$$(x-y)\,\nu+\phi_s(x_n)=(x-y)\,\nu_- +\frac{\phi_s(y_n)+\phi_s(x_n)}{2} \tag{85}$$

$$\text{avec } \nu'_\pm=\nu' \tag{86}$$

$$\text{et } (\nu_\pm)_n=\nu_n\pm\phi'_s\left(\frac{x_n+y_n}{2}\right). \tag{87}$$

On utilise alors $\nu_\pm$ comme nouvelles variables dans (82) et (83) et l'équation (81) devient :

$$[P, \pi_s] u(x) = C_1 (2\pi)^{-n/2} h^{-(n+(1/2))} \iint e^{i/h((x-y)\nu + 1/2(\phi_s(y_n)+\phi_s(x_n)))}$$

$$\times \left[p\left(\frac{x+y}{2}, \nu', \nu_n + \frac{\phi_s'}{2}\left(\frac{x_n+y_n}{2}\right)\right) - p\left(\frac{x+y}{2}, \nu', \nu_n - \frac{\phi_s'}{2}\left(\frac{x_n+y_n}{2}\right)\right)\right] \quad (88)$$

Un calcul trivial montre que :

$$\frac{\phi_s(y_n)+\phi_s(x_n)}{2} = i C_0 \left(\left(\frac{x_n+y_n}{2} - s \right)^2 + \frac{1}{4}(x_n - y_n)^2 \right). \quad (89)$$

$$\frac{1}{2}\phi_s'\left(\frac{x_n+y_n}{2}\right) = i C_0 \left(\frac{x_n+y_n}{2} - s \right). \quad (90)$$

Toute cette discussion est donc justifiée si :

$$\left| C_0 \left(\frac{x_n+y_n}{2} - s \right) \right| \leqq \delta, \qquad \delta < 1.$$

Cette vérification était inutile dans [13], parce que le domaine d'holomorphie pouvait être arbitrairement grand, mais nous devons être plus soigneux ici. En fait, il nous faudra choisir δ arbitrairement petit parce que nous souhaitons contrôler toutes les expressions dans des espaces L^2_ϕ (ou H^1_ϕ) à poids exponentiels (c'est-à-dire que $\Im \nu = \nabla d$).

Avant de déformer le contour d'intégration, nous allons donc mettre dans le terme d'erreur la contribution de l'intégrale correspondant à :

$$\left| C_0 \left(\frac{x_n+y_n}{2} - s \right) \right| > \frac{\delta}{2}.$$

Par exemple, nous devons contrôler l'opérateur ([5]) :

$$u \to R_s u(x) = C_1 (2\pi)^{-n/2} h^{-n-(1/2)} \iint e^{i/h((x-y)\nu + \phi_s(y_n))}$$

$$\times \beta\left(\frac{x_n+y_n}{2} - s \right) p\left(\frac{x+y}{2}, \nu \right) u(y)\, dy\, d\nu, \quad (91)$$

où β est une troncature nulle sur un voisinage de 0.

([5]) On montre le même résultat en prenant dans (91) les phases : $\frac{i}{h}((x-y)\nu + \phi_s(x_n))$ ou $\frac{i}{h}((x-y)\nu + (\phi_s(x_n) + \phi_s(y_n))/2)$.

On commence par remarquer que, par une petite déformation du contour d'intégration, on peut éliminer la contribution des y tels que $|x-y|>\delta_0$. Maintenant, pour $|x-y|<\delta_0$, on observe que, si δ_0 est suffisamment petit, alors, sur le support de :

$$(x, y) \to \beta\left(\frac{x_n+y_n}{2}-s\right),$$

on a :

$$|y_n-s|>\delta_1>0,$$

ce qui nous permet d'y utiliser l'inégalité

$$|\Im\,\phi_s(y_n)|>C_0\,\delta_1^2.$$

Ces contributions sont donc exponentiellement petites et l'opérateur R_s est un $O(e^{-\varepsilon_0/h})$ dans $\mathscr{L}(H^1, L^2)$.

Par des déformations de contour, on vérifie encore cette propriété dans $\mathscr{L}(H_\phi^1, L_\phi^2)$ à condition que $|\nabla\phi|\leqq\delta_2<1$.

Remarque 6. — Bien sûr, toutes ces estimations ne sont uniformes que localement par rapport à s, mais cela suffit, puisque nous travaillons sur le support de χ qui est compact.

Oublions un moment la fonction de troncature (ce qui ne posera pas de problèmes) et éliminons les termes de (88) qui sont indépendants de s. Appliquons (89), il nous faut alors étudier le terme :

$$e^{-(C_0/h)(((x_n+y_n)/2)-s)^2}\left\{p\left(\frac{x+y}{2}, \nu', \nu_n+i\,C_0\left(\frac{x_n+y_n}{2}-s\right)\right)\right.$$
$$\left.-p\left(\frac{x+y}{2}, \nu', \nu_n-i\,C_0\left(\frac{x_n+y_n}{2}-s\right)\right)\right\}, \quad (92)$$

pour les (x, y) tels que :

$$|x-y|+\left|\frac{x_n+y_n}{2}-s\right|\leqq\delta_3,$$

où δ_3 pourra être choisi aussi petit qu'il sera nécessaire.

Nous allons appliquer le [13], Lemme 7.4, que nous réécrivons ici :

LEMME 7. — *Soit p un symbole* $(z, \nu)\to p(z, \nu)$ *qui admet un prolongement analytique par rapport à* ν *pour* $|\Im\,\nu|\leqq\delta$, $\delta>0$.

Alors il existe un symbole formel, borné,

$$(z, \nu, \sigma)\to Q(z, \nu, \sigma)$$

défini pour :

$$|\Im\,\nu|^2+C_0^2\,\sigma^2\leqq\delta_4<1$$

tel que :

$$e^{-(1/h)\,C_0\sigma^2}\{p(z, \nu', \nu_n+i C_0\sigma)-p(z, \nu', \nu_n-i C_0\sigma)\}$$
$$\approx -h\,\partial_\sigma[e^{-(1/h)\,C_0\sigma^2}\,Q(z, \nu, \sigma)]. \quad (93)$$

Remarque 8. — Nous prendrons plus loin $z=(x+y)/2$, $\sigma=(x_n+y_n)/2-s$

Preuve. — Remarquons d'abord que la fonction :

$$\sigma \to p(z, \nu', \nu_n+i C_0\sigma)-p(z, \nu', \nu_n-i C_0\sigma)$$

est impaire. On montre alors facilement qu'il existe un unique symbole formel satisfaisant (93) :
Nous devons rédoudre :

$$2C_0\sigma Q-h\,\partial_\sigma Q=p(z, \nu', \nu_n+i C_0\sigma)-p(z, \nu', \nu_n-i C_0\sigma) \quad (94)$$

dans l'ensemble des symboles tels que :

$$Q(z, \nu, \sigma)=Q(z, \nu, -\sigma).$$

On réécrit (94) sous la forme :

$$(I-h\frac{1}{2C_0\sigma}.\partial_\sigma)Q=W,$$

où W est un symbole pair en σ et borné :

$$W(z, \nu, \sigma, h)=\frac{p(z, \nu', \nu_n+i C_0\sigma)-p(z, \nu', \nu_n-i C_0\sigma)}{2C_0\sigma}.$$

Le premier terme du développement semi-classique de Q est

$$Q_0=W$$

et on remarque que :

$$Q_0(z, \nu, \sigma=0)=i\,\partial_{\nu_n}p(z, \nu). \quad (95)$$

Dans [13], il est fait une hypothèse d'analyticité par rapport à la première variable $z(=(x+y)/2)$. Cette hypothèse n'est pas nécessaire. Mais si on fait une hypothèse d'analyticité sur p, on peut montrer l'analyticité du symbole Q à l'aide d'arguments analogues à ceux de [20] et la version analytique du lemme 7. devient :

LEMME 9. — *Soit p un symbole $(z, \nu)\to p(z, \nu)$ analytique par rapport à la première variable z et qui admet un prolongement analytique par rapport à ν pour $|\Im \nu|\leqq\delta$, $\delta>0$. Il existe alors un symbole Q analytique et borné,*

$$Q: \quad (z, \nu, \sigma)\to Q(z, \nu, \sigma)$$

défini pour :

$$|\Im \nu|^2+C_0^2\sigma^2\leqq\delta_4<1$$

tel que l'équation (93) soit vérifiée au sens des symboles analytiques.

Remarquons que l'opérateur de Klein-Gordon satisfait à cette hypothèse supplémentaire d'analyticité, car le potentiel V disparaît en raison du commutateur $[P, \pi_s]$ (il reste seulement le commutateur de $\sqrt{1-\Delta}$ avec π_s).

Revenons au commutateur $[P, \pi_s]$. En prenant des réalisations adéquates de Q_s et R_s nous avons :

$$[P, \pi_s] = h\,\partial_s Q_s + R_s, \tag{96}$$

• où l'opérateur Q_s est défini par [*cf.* (81)] :

$$(Q_s u)(x) = C_1 (2\pi)^{-n/2} h^{-n-1/2} \iint e^{(i/h)((x-y)\nu + ((\phi_s(x_n)+\phi_s(y_n))/2)} \tilde{\beta}(x-y)\,\tilde{\beta}\left(\frac{x_n+y_n}{2}-s\right) \times Q\left(\frac{x+y}{2}, \nu, \frac{x_n+y_n}{2}-s\right) u(y)\,dy\,d\nu, \tag{97}$$

• où $\tilde{\beta}$ est une fonction C^∞ dont le support est un voisinage de 0 suffisamment petit,

• où Q est holomorphe dans $|\Im \nu| \leqq \delta_4 < 1$,

• et où R_s est d'ordre $O(e^{-\varepsilon_0/h})$ dans $\mathscr{L}(H^1_\phi, L^2_\phi)$ pour tout ϕ tel que $|\nabla\phi| \leqq \delta_5 < 1$.

Nous pouvons maintenant calculer $((P-\lambda^d) u^g \mid u^d)$ modulo $O(e^{-(S+\varepsilon_0)/h})$, ou, si on ne fait pas d'hypothèse d'analyticité sur le potentiel V, modulo $O(h^\infty)\,O(e^{-S/h})$ (dans ce cas les constructions *BKW* approchent les fonctions propres avec une erreur $O(h^\infty)\,e^{-d(x)/h}$).

Soit χ une troncature valant 0 pour $s<0$ et pour $s>M+1$, 1 pour $s\in[0, M]$, et de classe C^1 si $s>0$. On applique (96) dans (81) et on peut majorer le reste aisément car u^d, $u^g \in H^1_{d(x)}$ et y ont une norme d'ordre $O(h^{-N})$:

$$((P-\lambda^d) u^g \mid u^d) = -h(u^g \mid Q_0 u^d) + O(e^{(-\varepsilon_0+S)/h}), \tag{98}$$

à condition que la distance d'Agmon satisfasse à l'équation $|\nabla d| \leqq \delta_5 < 1$.

Supposons encore qu'il existe une unique géodésique minimale entre les deux puits, et que cette géodésique coupe l'hyperplan $x_n = 0$ au point $y_0 = (y'_0, 0)$.

Alors, modulo un terme d'erreur du type de celui de (98), on peut remplacer le terme $(u^g \mid \mathscr{Q}_0 u^d)$ par $(\Psi u^d \mid \mathscr{Q}_0 \Psi u^g)$, où Ψ est une fonction à support compact proche de y_0 et valant 1 dans un petit voisinage de y_0. C'est une conséquence des propriétés de décroissance de u^d et u^g et de l'égalité :

$$\frac{\phi_0(y_n)+\phi_0(x_n)}{2} = i C_0 \frac{x_n^2+y_n^2}{2},$$

à appliquer dans (97).

Nous sommes ramenés à approcher u^d et u^g sur le support de Ψ, ce qui se fait à l'aide des constructions *BKW*. Nous devons donc estimer le terme :

$$h(\Psi u^{g,\,bkw} \,|\, Q_0 \Psi u^{d,\,bkw}), \tag{99}$$

l'erreur est de l'ordre de $O(h^\infty e^{-S/h})$ si V est seulement C^∞ et est d'ordre $O(e^{-(S+\varepsilon)/h})$ si V est analytique.
On réécrit (99) sous la forme :

$$e^{-S/h}(\Psi a^g(.,h) \,|\, e^{-(C_0 x_n^2 + d(x,-x_0) + d(x,x_0) - S)/h} \tilde{Q}_0 \Psi a^d(.,h)), \tag{100}$$

où $\tilde{Q}_0$ est un o.p.d. classique dont le symbole principal est calculable [à l'aide de (95)] :

$$i C_1 \partial_{\xi_n} p(x, \nu + i \nabla d(x, x_0)),$$

qui devient dans le cas de l'opérateur de Klein-Gordon :

$$C_1 \frac{i \xi_n}{\sqrt{1+\xi^2}}_{|\,\xi = \nu + i\nabla d}.$$

Sur le support de Ψ, on a :

$$\tilde{Q}_0 a^d(x,h) = \frac{-\partial_n d(x, x_0)}{\sqrt{1 - |\nabla d|^2}} a_0^d(x) + O(h).$$

Comme a_0^d ne s'annule pas pour la première valeur propre (c'est une conséquence de la première équation de transport), le symbole formel $\tilde{Q}_0 \Psi a^d$ est elliptique par rapport à h. Il suffit donc d'appliquer le théorème de la phase stationnaire pour obtenir un développement en puissances de h de (100). On fait donc la même hypothèse que dans [12] :

La géodésique minimale reliant les deux puits est non dégénérée,

c'est-à-dire que la restriction à l'hyperplan $x_n = 0$ de la fonction $x \to d(x, -x_0) + d(x, x_0) - S_0$ possède un minimum non dégénéré au point y_0.

Ceci implique, quitte à diminuer le support de Ψ autour de y, que la fonction :

$$D: \quad x \to D(x) = C_0 x_n^2 + d(x, -x_0) + d(x, x_0) - S_0 \tag{101}$$

possède un minimum non dégénéré unique en y_0. Notons que la matrice hessienne de D en y_0 prend la forme :

$$D''(y_0) = \begin{pmatrix} D''_{|\,x_n=0} & 0 \\ 0 & 2C_0 \end{pmatrix}. \tag{102}$$

En effet, la nullité des termes non diagonaux est une conséquence de la symétrie par rapport à l'hyperplan $x_n = 0$. De plus, si on paramètre la géodésique au voisinage de y_0 par :

$$t \to x(t) = y_0 + t x_n + t^2 \sum_{j=1}^{n} \lambda_i x_i^2 + O(t^3)$$

pour t voisin de 0, l'identité :

$$d(x(t), x_0) + d(x(t), -x_0) = \mathrm{S}$$

entraîne l'égalité des développements de Taylor à l'ordre 2. Or la symétrie par rapport à l'hyperplan $x_n = 0$ montre que seul le terme :

$$\frac{t^2}{2}(\partial_{x_n}^2 d(x, x_0) + \partial_{x_n}^2 d(x, -x_0))_{|x=y_0}$$

subsiste.

D'après la forme (102) de la matrice hessienne de D en y_0, les constantes C_0 et C_1 vont disparaître lorsqu'on calculera le terme principal de la phase stationnaire. D'où le :

THÉORÈME 10. — *Soit* V *un potentiel ayant deux puits symétriques non dégénérés aux points* x_0 *et* $-x_0$, *c'est-à-dire vérifiant les hypothèses rappelées au début de la section* 3.2.3 [*équations* (73, 74)] *et tel que :*

$$\mathrm{V}(x) < \mathrm{E} = \mathrm{V}(x_0) + 1, \qquad \mathrm{V}''(x_0) > 0.$$

Alors l'écart entre les deux premières valeurs propres de l'opérateur de Klein-Gordon est donné par :

$$\Delta\lambda = e^{-\mathrm{S}/h}(\sqrt{h}\, a(h) + \mathrm{R}(h)), \tag{103}$$

- *où* S *est la distance d'Agmon entre les deux puits, associée à la métrique* $(1 - (\mathrm{V}-\mathrm{E})^2(x))\, dx^2$,
- *où* $\mathrm{R}(h)$ *est d'ordre* $O(h^\infty)$ *si le potentiel* V *est seulement* C^∞ *et est d'ordre* $O(e^{-\varepsilon/h})$ *si le potentiel est analytique,*
- *où* $a(h)$ *est un symbole semi-classique, elliptique par rapport à* h :

$$a(0) = \mathrm{C}_n \frac{\partial_n d(x, x_0)}{\mathrm{V}(x) - \mathrm{E}_{|x=y_0}} \times \frac{1}{\sqrt{\mathrm{D}''_{|x_n=0}}} |a_0^d|^2(y_0).$$

Ici C_n *est une constante ne dépendant que de la dimension,* D *est la fonction définie en* (101), a_0^d *le symbole principal de l'approximation BKW et* y_0 *l'intersection de la géodésique minimale reliant les deux puits avec l'hyperplan* $x_n = 0$.

3.3. Comparaison des effets tunnels dans le cadre semi-classique

Résumons les résultats que nous avons obtenus dans les sections 3.1. et 3.2.3.

Pour l'opérateur de Dirac, le théorème 3 donne un écart entre les deux premières valeurs propres du type :

$$\Delta\lambda = e^{-S/h}(C\sqrt{h} + O(h)), \qquad C>0,$$

où S est la distance d'Agmon entre les deux puits symétriques, associée à la métrique $(1-(V(x)-E)^2)\,dx^2$, sous l'hypothèse que $V(x)\in[E-1, E+1]$.

Pour l'opérateur de Klein-Gordon, le théorème 10 donne un écart entre les deux premières valeurs propres du type :

$$\Delta\lambda = e^{-S/h}(C\sqrt{h} + O(h)), \qquad C>0,$$

où S est la distance d'Agmon entre les deux puits symétriques, associée à la métrique $(1-(V(x)-E)^2)\,dx^2$, *mais ici sous l'hypothèse que* $V(x)\in[E-1, E[$.
Lorsque $V(x)\geqq E$, on a seulement la majoration (pour tout $\varepsilon>0$) :

$$\Delta\lambda = O_\varepsilon(e^{-(S-\varepsilon)/h}),$$

où S est la distance d'Agmon entre les deux puits symétriques, associée à la métrique $(1-(V(x)-E)^2)\,dx^2$ si $V(x)<E$ et à la métrique euclidienne si $V(x)>E$.

Comparons maintenant ces résultats :

- si $V(x)$ reste dans l'intervalle $[E-1, E[$ le long de la géodésique minimale reliant les deux puits symétriques, les équivalents de l'effet tunnel sont comparables. C'est le cas de la limite non relativiste ou plus généralement lorsque le potentiel varie moins que l'énergie de masse de la particule (rappelons que nous avons vu à la Remarque 1 que le « 1 » dans $[E-1, E[$ correspondait à l'énergie de masse mc^2 de la particule).
- si $V(x)$ devient supérieur à E le long de la géodésique minimale, l'équivalent de l'effet tunnel pour l'opérateur de Dirac est exponentiellement plus grand ([6]) que la majoration de l'effet tunnel pour l'opérateur de Klein-Gordon. En effet, on a l'inégalité :

$$d_{KG}(x_0, -x_0) > d_D(x_0, -x_0),$$

puisque la métrique d'Agmon pour l'opérateur de Klein-Gordon, qui est en fait la métrique euclidienne, « éloigne » plus les points que la métrique d'Agmon pour Dirac.

Il serait agréable dans cette situation d'obtenir un équivalent de l'effet tunnel pour l'opérateur de Klein-Gordon ce qui nécessiterait d'obtenir une bonne approximation des fonctions propres dans la zone $V(x)>E$ qui prolongerait la construction *BKW* [de la zone $V(x)<E$].

([6]) S. de Bièvre nous a fait remarquer que dans ces conditions, le modèle à 1 particule n'est sans doute pas valide physiquement puisque le champ contient alors assez d'énergie pour créer une autre particule.

• si $V(x)>E+1$, alors la majoration de l'effet tunnel pour Klein-Gordon est toujours valable, mais pour l'opérateur de Dirac, il n'y a plus forcément de valeur propre puisqu'il existe un puits (d'antiparticule) qui n'est pas forcément compact (apparition possible de résonances ou d'autres valeurs propres).

APPENDICE

CONSTRUCTION DES SOLUTIONS LIBRES DE L'OPÉRATEUR DE DIRAC AVEC POTENTIEL COMPACT ET RADIAL

On considère l'opérateur de Dirac :

$$D(h)=\sum_{j=1}^{3} \alpha_j D_j-\alpha_4+V(r).I_4, \tag{104}$$

où V est un potentiel que l'on supposera C^∞ et à support compact (sauf à la section A.1.).

On commencera par donner l'opérateur de Dirac en coordonnées sphériques, on en déduira la forme générale des solutions et le système différentiel ne dépendant que de r qui permet de trouver les valeurs propres et la partie radiale des fonctions propres.

Dans la section suivante, on supposera que l'on connaît une valeur propre E, et on calculera la taille des fonctions propres à l'infini (en résolvant l'équation radiale hors du compact où V est supporté).

Enfin, on en déduira l'estimation sur l'écart entre valeurs propres dans le problème du tight-binding de la section 2.3.

A.1. Décomposition radiale-angulaire

Dans cette section, on résume brièvement la méthode permettant de découpler les parties radiales et angulaires de l'opérateur de Dirac. On pourra trouver les détails dans les deux articles originaux de Dirac ([6] et [5]) ou dans le livre de B. Thaller ([22], pp. 123-126).

On décompose le système différentiel 4×4 de Dirac suivant les 2 premières et 2 dernières composantes :

$$\left(\sum_{j=1}^{3} \alpha_j D_j+\alpha_4+V.I_4\right)\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}, \tag{105}$$

que l'on réécrit en :

$$\left(\sum_{j=1}^{3} D_j \sigma_j\right)\phi_2 + (1+V-E)\,\phi_1 = 0$$

$$\left(\sum_{j=1}^{3} D_j \sigma_j\right)\phi_1 + (-1+V-E)\,\phi_2 = 0.$$

Si on pose alors :

$$\sigma_r = \frac{1}{r}\left(\sum_{j=1}^{3} x_j \sigma_j\right), \tag{106}$$

le vecteur unitaire radial, et si on fait le changement d'inconnue $\phi_2 = \sigma_r \phi'_2$, on peut montrer que le système à résoudre devient :

$$P\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi'_2\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi'_2\end{pmatrix}, \tag{107}$$

$$P = \begin{pmatrix} 1+V & \frac{1}{i}\left(\partial_r + \frac{1}{r}\left(J_\sigma + \frac{1}{2}\right)\right) \\ \frac{1}{i}\left(\partial_r - \frac{1}{r}\left(J_\sigma - \frac{3}{2}\right)\right) & -1+V \end{pmatrix}$$

où J_σ désigne le moment cinétique total (y compris le spin). Les moments cinétiques totaux sont définis à partir des moments cinétiques L_j de la théorie non relativiste par :

$$J_\sigma = \sum_{j=1}^{3} J_{j,2}\,\sigma_j, \qquad J_{j,2} = L_j + \frac{1}{2i}\sigma_k \sigma_l, \qquad L_j = (x_k D_l - x_l D_k). \tag{108}$$

[Dans (108), les indices k et l sont tels que (j, k, l) soit un cycle direct]. Les opérateurs J_σ, $J_{3,2}$ et l'opérateur :

$$J_2^2 = \sum_{j=1}^{3} J_{j,2}^2 \tag{109}$$

forment un « ECOC » (ensemble complet d'observables qui commutent) au sens que leurs fonctions propres communes forment une base hilbertienne de $L^2([0, \pi]_\theta \times [0, 2\pi]_\phi, \mathbb{C}^2; \sin\theta\, d\theta\, d\phi)$. On montre que ces fonctions propres communes s'écrivent sous la forme :

$$\beta(\theta, \phi) = \phi_{lmj} \qquad \text{où} \quad \begin{cases} J_{3,2}\,\phi_{lmj} = m\,\phi_{lmj} \\ J_2^2\,\phi_{lmj} = l(l+1)\,\phi_{lmj}, \\ J_\sigma\,\phi_{lmj} = j\,\phi_{lmj}, \end{cases} \tag{110}$$

où les valeurs possibles de l, m et j sont :

- $l \in \frac{1}{2} + \mathbb{N}$,
- $m \in \{-l, -l+1, \ldots, l-1, l\}$, soit $2\left(l+\frac{1}{2}\right)$ valeurs possibles,
- $j=l+1$ ou $j=-l$.

On définit alors les opérateurs $J_{j,4}$, J_4^2 et J_α par :

$$J_{j,4}=\begin{pmatrix} J_{j,2} & 0 \\ 0 & J_{j,2} \end{pmatrix}, \qquad J^2=\sum_{j=1}^{3}(J_{j,4})^2=\begin{pmatrix} J_2^2 & 0 \\ 0 & J_2^2 \end{pmatrix}, \qquad J_\alpha=\begin{pmatrix} J_\sigma & 0 \\ 0 & J_\sigma \end{pmatrix}.$$

On peut alors prouver que les opérateurs P, $J_{3,4}$, J^2 et J_α commutent. On peut donc rechercher leurs fonctions propres communes. On montre facilement que les fonctions propres communes des moments cinétiques sont de la forme :

$$\alpha(r)\begin{pmatrix} \phi_{lmj} \\ 0 \end{pmatrix}+\beta(r)\begin{pmatrix} 0 \\ \phi_{lmj} \end{pmatrix}.$$

En posant $\alpha(r)=f(r)$ et $\beta(r)=ig(r)$, l'équation (105) devient un système où il ne subsiste que la dépendance en r :

$$(1+V)f+\left(\partial_r+\frac{1}{r}\left(j+\frac{1}{2}\right)\right)g=Ef,$$
$$(-1+V)g-\left(\partial_r-\frac{1}{r}\left(j-\frac{3}{2}\right)\right)f=Eg.$$

Finalement, les solutions de Dirac radial s'obtiennent sous la forme :

$$\begin{pmatrix} f(r)\phi_{lmj} \\ \sigma_r g(r)\, i\phi_{lmj} \end{pmatrix}, \qquad l\in\frac{1}{2}+\mathbb{N}, m\in\{-l, \ldots, l\}, j\in\{l+1, -l\}, \tag{111}$$

où f et g sont solutions du système différentiel :

$$\left(\partial_r+\frac{1}{r}\left(j+\frac{1}{2}\right)\right)g(r)=(E-V(r)-1)f(r),$$
$$\left(\partial_r-\frac{1}{r}\left(j-\frac{3}{2}\right)\right)f(r)=(V(r)-E-1)g(r),$$

l'appartenance à l'espace L^2 des fonctions A et B de (105) est alors équivalente à $f(r)$, $g(r)\in L^2(r^2\,dr)$. On pose $F=rf$, $G=rg$ pour donner une forme plus symétrique au système et on cherche des fonctions F et G dans $L^2(r\,dr)$ satisfaisant le système :

$$\left.\begin{aligned} \partial_r F - \frac{1}{r}\left(j-\frac{1}{2}\right)F &= (V(r)-E-1)G \\ \partial_r G + \frac{1}{r}\left(j-\frac{1}{2}\right)G &= (E-V(r)-1)F \end{aligned}\right\} \tag{112}$$

Remarquons que la donnée d'un couple $(F(r_0), G(r_0))$ détermine une solution unique du système (112).

Terminons en donnant le lien entre les ϕ_{lmj} et les harmoniques sphériques scalaires $|lm\rangle$, fonctions propres à valeur dans $\mathbb{C}$ communes aux opérateurs L_3 et L^2. On montre ainsi, en appliquant les définitions des opérateurs J en fonction des L que :

$$\left.\begin{aligned} \phi_{l,m,-l} &= \frac{1}{\sqrt{2l+2}}\begin{pmatrix} -\sqrt{l+1-m}\left|l+\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}\right\rangle \\ \sqrt{l+1+m}\left|l+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}\right\rangle \end{pmatrix}, \\ \phi_{l,m,l+1} &= \frac{1}{\sqrt{2l}}\begin{pmatrix} \sqrt{l+m}\left|l-\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}\right\rangle \\ \sqrt{l-m}\left|l-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}\right\rangle \end{pmatrix}. \end{aligned}\right\} \tag{113}$$

Rappelons que $L_3 = i\partial_\theta$ et $L^2 = -\partial_\phi^2 - \partial_\theta^2/\sin^2\theta$, ce qui permet de calculer explicitement les $|lm\rangle$ en fonction de θ et ϕ :

$$\left.\begin{aligned} |lm\rangle(\theta, \phi) &= C_{l,m}\, e^{im\phi}\, P_{l,m}(\cos\theta), \\ P_{l,m}(x) &= (1-x^2)^{m/2}\left(\frac{d}{dx}\right)^{l+m}(x^2-1)^l, \\ C_{l,m} &= \frac{(-1)^l}{2^l\, l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(1+m)!}}. \end{aligned}\right\} \tag{114}$$

Comme toutes les puissances de $(x^2-1)^l$ sont paires, on voit facilement que :

$$P_{l,m}(0) = 0 \text{ si et seulement si } l+m \text{ est impair.} \tag{115}$$

A.2. Potentiel tendant vers 0 à l'infini

Dans la suite, on posera :

$$\mu = j - \frac{1}{2} \in \mathbb{Z}^*, \qquad a = \sqrt{1 - \mathrm{E}^2}. \tag{116}$$

On suit pour commencer la méthode permettant de trouver les valeurs propres de l'opérateur de Dirac avec potentiel coulombien (utilisée par Gordon pour déterminer les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène en 1928, ce qui lui permet de justifier l'existence de la constante de structure fine α : *cf.* [7]). On effectue un nouveau changement de fonction en posant :

$$\begin{pmatrix} \mathrm{F} \\ \mathrm{G} \end{pmatrix} = e^{-ar} \begin{pmatrix} \mathrm{H} \\ \mathrm{I} \end{pmatrix}, \tag{117}$$

où a est défini en (116). Le système à résoudre se traduit en :

$$\partial_r \begin{pmatrix} \mathrm{H} \\ \mathrm{I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a + \frac{\mu}{r} & \mathrm{V}(r) - \mathrm{E} - 1 \\ \mathrm{V}(r) + \mathrm{E} - 1 & a - \frac{\mu}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{H} \\ \mathrm{I} \end{pmatrix}. \tag{118}$$

On diagonalise ce système à l'infini. La matrice à diagonaliser est :

$$\begin{pmatrix} a & -\mathrm{E} - 1 \\ \mathrm{E} - 1 & a \end{pmatrix}$$

dont les valeurs propres sont 0 et $2a$. Une matrice de passage est donnée par :

$$\mathrm{P} = \begin{pmatrix} \mathrm{E}+1 & a \\ a & \mathrm{E}-1 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{P}^{-1} = \frac{1}{2a^2} \begin{pmatrix} 1-\mathrm{E} & a \\ a & -1-\mathrm{E} \end{pmatrix}.$$

Il reste à poser :

$$\begin{pmatrix} \mathrm{H} \\ \mathrm{I} \end{pmatrix} = \mathrm{P} \begin{pmatrix} \phi \\ \Psi \end{pmatrix}, \tag{119}$$

pour simplifier le système en :

$$\partial_r \begin{pmatrix} \phi \\ \Psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{E}}{a} \mathrm{V}(r) & \frac{1-\mathrm{E}}{a} \left(\frac{\mu}{r} + \mathrm{V}(r) \right) \\ \frac{1+\mathrm{E}}{a} \left(\frac{\mu}{r} - \mathrm{V}(r) \right) & 2a - \frac{\mathrm{E}}{a} \mathrm{V}(r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \Psi \end{pmatrix}. \tag{120}$$

Les fonctions ϕ et Ψ doivent être dans $\mathrm{L}^2(re^{-ar}\,dr)$.

Pour un potentiel coulombien, on remplacerait alors $\mathrm{V}(r)$ par $\frac{\tau}{r}$, où τ est une constante et le système (120) n'admet de solutions que pour certaines valeurs de l'énergie E. Dans notre situation (V à support compact), on suppose au contraire que E est connu et on va estimer la taille de la fonction propre correspondante.

A.3. Potentiel à support compact

Cherchons les couples (ϕ, Ψ) solutions du système (120) que l'on réécrit pour r suffisamment grand en :

$$\left.\begin{aligned} \partial_r \phi &= \frac{(1-\mathrm{E})\mu}{ar}\Psi \\ \partial_r \Psi &= \frac{(1+\mathrm{E})\mu}{ar}\phi + 2a\Psi. \end{aligned}\right\} \tag{121}$$

Une fois toutes les solutions trouvées, on verra que l'appartenance à $\mathrm{L}^2(re^{-ar}dr)$ entraîne des conditions de décroissance sur ϕ et Ψ.

On commence par chercher un couple développable en série entière. Plus précisément, on commence par poser :

$$\begin{pmatrix} \phi \\ \Psi \end{pmatrix} = r^\lambda \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \tag{122}$$

où on cherche λ et (u, v) développable en série entière satisfaisant à :

$$\left.\begin{aligned} r\partial_r u &= -\lambda u + \frac{(1-\mathrm{E})\mu}{a} v \\ r\partial_r v &= \frac{(1+\mathrm{E})\mu}{a} u + (-\lambda + 2ar)v \end{aligned}\right\}. \tag{123}$$

D'où pour tout n le système :

$$(-\lambda - n)u_n + \frac{(1-\mathrm{E})\mu}{a} v_n = 0 \tag{124}$$

$$\frac{(1+\mathrm{E})\mu}{a} u_n + (-\lambda - n)v_n = -2av_{n-1}, \tag{125}$$

avec la convention $v_{-1}=0$. On fixe λ de sorte que (u_0, v_0) ne soit pas (0, 0) (on veut construire une solution non nulle !). Le déterminant de (124) doit donc être nul pour $n=0$ ce qui, d'après la définition (116) de a équivaut à $\lambda = \pm\mu$. Chacune des deux valeurs possibles de λ nous donnera une solution, on aura ainsi une base de solutions.

Pour $n>0$, $n \neq -2\lambda$, le système est équivalent à :

$$u_n = \frac{2a(n+\lambda)}{n(n+2\lambda)} v_{n-1}, \qquad u_n = \frac{2(1-\mathrm{E})\mu}{n(n+2\lambda)} v_{n-1}. \tag{126}$$

Si on choisit de prendre $\lambda<0$, on constate que les v_n et u_n sont déterminés de façon unique pour $n<-2\lambda$ par la donnée de v_0. On s'aperçoit que si $v_0\neq 0$, on a :

$$v_{-\lambda}=0, v_{-\lambda-1}\neq 0, \qquad u_{-\lambda+1}=0, u_{-\lambda}\neq 0. \tag{127}$$

Il existe donc une solution du système (121) de la forme :

$$\phi_1(r)=r^{-|\mu|}\mathrm{P}(r), \qquad \Psi_1(r)=r^{-|\mu|}\mathrm{Q}(r), \tag{128}$$

où P est un polynôme de degré $|\mu|$ et Q un polynôme de degré $|\mu|-1$.

Si on choisit de prendre la solution λ positive, le déterminant du système est alors $n^2+2\lambda n$ et est donc non nul pour $n>0$. Pour $n=0$, on a :

$$u_0=\frac{(1-\mathrm{E})\mu}{a\lambda}v_0.$$

Ainsi tous les u_n et v_n sont uniquement déterminés par la donnée de v_0 que l'on supposera non nul, pour construire une solution non nulle. La relation (126) prouve que $\tilde{v}=\sum v_n r^n$ est une série entière de rayon de convergence $\mathrm{R}=+\infty$, de même que $\tilde{u}=\sum u_n r^n$. On va d'ailleurs estimer la taille de u et v.

On constate que :

$$v_n=\frac{2a}{(n+\lambda)}\frac{1}{1-(\lambda^2/(n+\lambda)^2)}v_{n-1},$$

où $\lambda=\pm\mu=\pm\left(j-\dfrac{1}{2}\right)$ est un entier naturel. Il existe donc une constante $\mathrm{C}>0$ (si $v_0>0$) telle que :

$$v_k=\mathrm{C}\frac{(2a)^{k+\lambda}}{(k+\lambda)!}\prod_{n=1}^{k}\frac{1}{1-(\mu^2/(n+\lambda)^2)}. \tag{129}$$

Or, le produit est convergent, ce qui entraîne l'existence d'une constante $\mathrm{D}>0$, telle que pour k assez grand (fonction de $\varepsilon>0$) :

$$(\mathrm{D}-\varepsilon)\frac{(2a)^{k+\lambda}}{(k+\lambda)!}<v_k<(\mathrm{D}+\varepsilon)\frac{(2a)^{k+\lambda}}{(k+\lambda)!}. \tag{130}$$

et en revenant aux fonctions ϕ et Ψ, on obtient pour tout $\varepsilon>0$, l'existence d'un polynôme P_ε (dont le degré dépend de ε) tel que :

$$(\mathrm{D}-\varepsilon)e^{2ar}-\mathrm{P}_\varepsilon(r)<\Psi(r)<(\mathrm{D}+\varepsilon)e^{2ar}-\mathrm{P}_\varepsilon(r), \tag{131}$$

d'où l'on déduit un équivalent de Ψ, puis, grâce au système (121), un équivalent de ϕ :

$$\Psi(r)\sim_{r\to\infty}\mathrm{D}e^{2ar}, \qquad \phi(r)\sim_{r\to\infty}\frac{(1-\mathrm{E})\mu}{2a^2 r}\mathrm{D}e^{2ar}. \tag{132}$$

On notera (ϕ_2, Ψ_2) ce couple de solutions.

Revenons maintenant à la recherche de *tous* les couples (ϕ, Ψ). Du système (121), on déduit une équation différentielle du second ordre en Ψ :

$$\partial_r (r \, \partial_r \Psi) = \frac{\mu^2}{r} \Psi + \partial_r (2 \, ar \Psi) \tag{133}$$

dont on connaît deux solutions visiblement indépendantes. Donc tout couple de solutions de (121) est combinaison linéaire des couples (ϕ_1, Ψ_1) et (ϕ_2, Ψ_2). Seules les combinaisons linéaires du couple (ϕ_1, Ψ_1) satisfont à la condition d'appartenance à $L^2 (re^{-ar} dr)$. Le comportement asymptotique de ce couple se déduit de l'équation (128) :

$$\phi_1 (r) \sim_{r \to +\infty} -2 \frac{(1-\mathrm{E})}{\mu} \mathrm{C}, \qquad \Psi_1 (r) \sim_{r \to +\infty} \frac{\mathrm{C}}{r}. \tag{134}$$

Revenant par la matrice de passage P à H et I, puis par (117) à F et G, et enfin par $\mathrm{F} = rf$, $\mathrm{G} = rg$, on obtient les équivalents des fonctions $f(r)$ et $g(r)$ de (111) [7] :

Soit $(f(r), g(r)) = (0, 0)$, soit il existe $\mathrm{D} > 0$/

$$f(r) \sim_{r \to \infty} \frac{\mathrm{D}(\mathrm{E}+1)}{r} e^{-ar}, \qquad g(r) \sim_{r \to \infty} \frac{a\mathrm{D}}{r} e^{-ar}. \tag{135}$$

A.4. Application au problème du tight-binding

Pour calculer l'écart entre les deux premières valeurs propres de l'opérateur de Dirac, nous devions estimer (39). On commence comme dans le cas semi-classique (section 3.1.) mais au lieu d'utiliser l'approximation *BKW* pour les fonctions propres, on se sert de la forme (111) des solutions et de l'équivalent de f et g. Il s'agit donc d'estimer [*cf.* (57)] :

$$\left.\begin{aligned} & -\frac{1}{i} \iint_{x_1 = 0} (\alpha_1 u(x + \mathrm{R}.e_1) \,|\, u(x - \mathrm{R}e_1)) \\ \text{et} \quad & \\ & -\frac{1}{i} \iint_{x_1 = 0} (\alpha_1 u(x + \mathrm{R}.e_1) \,|\, \mathrm{K} u(x - \mathrm{R}e_1)), \end{aligned}\right\} \tag{136}$$

où K est l'opérateur de Kramers et où u est donné en (111).

[7] Rappelons que l'argument d'unicité de la solution (f, g) empêche f et g d'être à support compact sauf s'ils sont identiquement nuls.

Le premier intégrant dans (136) est :

$$\left(\begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f(r)\,\phi_{lmj}(\mathrm{R}, x_2, x_3) \\ i\,\sigma_r\, g(r)\,\phi_{lmj}(\mathrm{R}, x_2, x_3) \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} f(r)\,\phi_{lmj}(-\mathrm{R}, x_2, x_3) \\ i\,\sigma_r\, g(r)\,\phi_{lmj}(-\mathrm{R}, x_2, x_3) \end{pmatrix}\right),$$

où on rappelle que σ_r a été définie en (106). On peut réécrire ce terme sous la forme :

$$(f(r)\,g(r)\,\phi_{lmj}(-\mathrm{R}, x') \,|\, i(\sigma_1\,\sigma_r(\mathrm{R}, x') - \sigma_r(-\mathrm{R}, x')\,\sigma_1)\,\phi_{lmj}(\mathrm{R}, x')),$$

qui se simplifie puisque les matrices de Pauli anticommutent :

$$\sigma_1\,\sigma_r(\mathrm{R}, x') = -\sigma_r(-\mathrm{R}, x')\,\sigma_1.$$

On fait de même avec le deuxième intégrant, on trouve alors :

$$(f(r)\,g(r)\,\overline{\phi_{lmj}(-\mathrm{R}, x')} \,|\, 2\,i\,\sigma_1\,\sigma_r(\mathrm{R}, x')\,\sigma_2\,\phi_{lmj}(\mathrm{R}, x')).$$

Un petit calcul algébrique avec les matrices de Pauli montre alors que :

$$\forall\, u, v \in \mathbb{C}^2, \quad |u|^2 \times |v|^2 = |(u\,|\,v)|^2 + |(u\,|\,\sigma_2\,\bar{v})|^2. \tag{137}$$

On en déduit que l'écart entre les deux valeurs propres $\Delta\lambda$ de (39) se ramène à :

$$\Delta\lambda = O(e^{-4a\mathrm{R}}) + \iint_{x_1=0} |f(r)|\,|g(r)|\,\|\sigma_1\,\sigma_r\,\phi_{lmj}(x - \mathrm{R}\,.\,e_1)\| \times \|\phi_{lmj}(x + \mathrm{R}\,.\,e_1)\|\,dx_2\,dx_3. \tag{138}$$

Or $dx_2\,dx_3 = r^2\,d\theta\,d\phi/\cos\phi$, donc :

$$\Delta\lambda = O(e^{-4a\mathrm{R}}) + \int_{(\theta,\,\phi)\,\in\,[0,\,\pi]\times[-\pi/2,\,\pi/2]} fg(r)\,\|\phi_{lmj}(\theta, \pi - \phi)\| \times \|\phi_{lmj}(\theta, \phi)\|\,\frac{r^2}{\cos\phi}\,d\theta\,d\phi.$$

Les équivalents de $|f(r)|$ et $|g(r)|$ donnent alors :

$$\Delta\lambda = O(e^{-4a\mathrm{R}}) + \mathrm{C}\int_{(\theta,\,\phi)\,\in\,[0,\,\pi]\times[-\pi/2,\,\pi/2]} e^{-2a\mathrm{R}/\sin\theta\cos\phi}\,\frac{1}{\cos\phi} \times \|\phi_{lmj}(\theta, \pi - \phi)\|\,\|\phi_{lmj}(\theta, \phi)\|\,d\theta\,d\phi.$$

On commence par évaluer l'intégrale sur :

$$\theta \in [\delta, \pi], \quad \phi \in \left[-\frac{\pi}{2} + \delta, -\frac{\pi}{2} - \delta\right],$$

l'erreur commise est absorbée dans le reste $O(e^{-4a\mathrm{R}})$ pour δ suffisamment petit. On applique alors le lemme de la phase stationnaire $(\mathrm{R} \to +\infty)$. La phase est critique pour :

$$\cos\theta = 0, \qquad \sin\phi = 0,$$

i.e. pour :

$$\theta=\frac{\pi}{2}, \qquad \phi=0.$$

En ce point, le symbole vaut :

$$\frac{1}{\cos\phi}\left\|\phi_{lmj}\left(\frac{\pi}{2}, \pi\right)\right\|\left\|\phi_{lmj}\left(\frac{\pi}{2}, 0\right)\right\| = \mathrm{C}\,(\mathrm{P}_{l+1/2,\, m-1/2}(0)^2+\mathrm{P}_{l+1/2,\, m+1/2}(0)^2),$$

où $\mathrm{P}_{l,m}$ a été défini en (114). Comme $l+m$ et $l+m+1$ n'ont pas la même parité, le symbole n'est pas nul au point critique ce qui permet de montrer que :

$$\Delta\lambda=\frac{\mathrm{C}}{\mathrm{R}}e^{-2a\mathrm{R}}, \qquad a=\sqrt{1-\mathrm{E}^2}. \tag{139}$$

Remarque 11. — Avant de comparer les constantes de décroissance exponentielle a de (139) et d_ε de (39), il ne faut pas oublier de décaler E de 1. En effet dans cet appendice, on a supposé que V était à support compact ($\lim_\infty \mathrm{V}=0$) alors qu'à la section 2.2, on supposait que $\lim_\infty \mathrm{V}=-1$.

RÉFÉRENCES

[1] M. BRUNAUD and B. HELFFER, Un problème de double puits provenant de la théorie statistico-mécanique des changements de phase, *Prépublication de l'ENS*, 1991.

[2] R. CARMONA, Path Integral for Relativistic Schrödinger Operators, *Lecture Notes in Physics*, *Schrödinger operators*, Vol. **345**, 1988, p. 65-92.

[3] R. CARMONA, W. MASTERS and B. SIMON, Relativistic Schrödinger Operators: Asymptotic Behaviour of the Eigenfunctions, *Journal of Functional Analysis*, 1992 (à paraître).

[4] F. DAUMER, *Equation de Schrödinger dans l'approximation du tight binding*, PhD thesis, Université de Nantes, février 1990 (et à paraître in *Comm. in PDE*).

[5] P. DIRAC, The Elimination of the Nodes in Quantum Mechanics, *Proc. Royal Soc. A*, Vol. **111**, 1926, p. 281-305.

[6] P. DIRAC, The Quantum Theory of the Electron, *Proc. Royal Soc. A*, Vol. **117**, 1927, p. 610-625.

[7] W. GORDON, Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms nach der Diracschen Quantentheorie des Elektrons, *Zeitschrift für Physik*, Vol. **48**, 1928, p. 11-14.

[8] B. HELFFER, *Introduction to the Semi-Classical Analysis for the Schrödinger Operator and Applications*, Springer Lecture Notes in Math., 1336.

[9] B. HELFFER, Décroissance exponentielle des fonctions propres pour l'opérateur de Kac, *Operator Theory: Advances and Applications*, Vol. **57**, 1992.

[10] B. HELFFER, J. NOURRIGAT et X. P. WANG, Spectre essentiel pour l'équation de Dirac, *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure*, Vol. **22**, 1989, p. 515-533.

[11] B. HELFFER et D. ROBERT, Calcul fonctionnel pour la transformée de Mellin et applications, *Journal of Functional Analysis*, Vol. **53**, (3), octobre 1983, p. 246-268.

[12] B. HELFFER et J. SJÖSTRAND, Multiple Wells in the Semi-Classical Limit-I, *Communication in Partial Differential Equation*, Vol. **9**, (4), 1984, p. 337-408.

[13] B. HELFFER et J. SJÖSTRAND, Analyse semi-classique pour l'équation de Harper (avec application à l'étude de l'équation de Schrödinger avec champ magnétique), *Mémoire de la Société Mathématique de France*, Vol. **116**, (34,4), 1988.

[14] L. HÖRMANDER, The Weyl Calculus of Pseudo-Differential Operators, *C.P.A.M.*, Vol. **32**, 1979, p. 359-443.

[15] V. IVRII, Remainder Estimates for the Weyl Formula, *Prépublication École Polytechnique* et livre en préparation, 1990, 1991, 1992.

[16] A. MOHAMED et B. PARISSE, Approximation des valeurs propres de certaines perturbations singulières et application à l'opérateur de Dirac, *Annales de l'Institut Henri Poincaré (Physique Théorique)*, Vol. **56**, (3), 1992, p. 235-277.

[17] B. PARISSE, Résonances pour l'opérateur de Dirac – II, *Helvetica Physica Acta*, Vol. **65**, (8), 1992, p. 1077-1118.

[18] B. PARISSE, *Résonances pour l'opérateur de Dirac*, PhD thesis, Université de Paris-Sud, janvier 1992.

[19] D. ROBERT, *Autour de l'approximation semi-classique*, Vol. **68**, Birkhäuser, Progress in Maths., 1987.

[20] J. SJÖSTRAND, *Singularités analytiques microlocales*, Vol. **95**, Astérique, 1982.

[21] H. TAMURA, The Asymptotic Distribution of Discrete Eigenvalues for Dirac Operators, *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA Math.*, Vol. **23**, (1), 1976, p. 167-197.

[22] B. THALLER, *The Dirac Equation*, Springer Verlag, Texts and Monographs in Physics, 1992.

[23] X.-P. WANG, Puits multiples pour l'opérateur de Dirac, *Annales de l'I.H.P., Physique Théorique*, Vol. **43**, (3), 1985, p. 269-319.

[24] X.-P. WANG, *Asymptotiques semi-classiques pour les opérateurs de Schrödinger et de Dirac*, Thèse de l'Université de Nantes, novembre 1986.

(*Manuscrit reçu le* 12 *février* 1993.)