

ANNALI DELLA SCUOLA NORMALE SUPERIORE DI PISA *Classe di Scienze*

B. HELFFER

J. SJÖSTRAND

Effet tunnel pour l'équation de Schrödinger avec champ magnétique

Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa, Classe di Scienze 4^e série, tome 14, n° 4 (1987), p. 625-657

http://www.numdam.org/item?id=ASNSP_1987_4_14_4_625_0

© Scuola Normale Superiore, Pisa, 1987, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa, Classe di Scienze » (<http://www.sns.it/it/edizioni/riviste/annaliscienze/>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

Effet Tunnel pour l'Equation de Schrödinger avec Champ Magnetique

B. HELFFER - J. SJÖSTRAND

On se propose dans cet article d'étudier le spectre "au fond du puits" pour un opérateur de Schrödinger avec champ magnétique défini sur $\mathbb{R}^n$.

$$(0.1) \quad P(h) = \sum_{j=1}^n (ih\partial_{x_j} - A_j)^2 + V(x)$$

dans l'esprit de notre premier article [HE - SJ]₁, c.à.d. dans un contexte semi-classique lorsque $h \rightarrow 0$.

Pour $h > 0$ fixé, la théorie spectrale pour ce type d'opérateurs a été étudiée en détail, particulièrement dans une série d'articles de J. Avron - I. Herbst et B. Simon [A - H - S] (cf. également le survey de Hunziker [HU] et un travail plus récent de A. Mohamed [MO]).

On suppose ici que $V(x)$ est un potentiel C^∞ tel que:

$$(0.2) \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} V > 0 \text{ et } V^{-1}(0) \text{ non vide}$$

et on s'intéresse à l'étude du spectre dans un intervalle $I(h)$ tendant vers 0 (i.e. $I(h) =]\alpha(h), \beta(h)[$ avec $\alpha(h) \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0, \beta(h) \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0$).

Notons que h ne parcourt pas nécessairement $]0, h_0]$ mais peut parcourir seulement une partie de $]0, h_0]$ admettant 0 comme point d'accumulation.

On suppose que $A_j \in C^\infty$ et, sous l'hypothèse 0.2, il est classique que le spectre est ponctuel dans $I(h)$.

Pour des raisons techniques, nous ne pourrions aborder que le cas où A est petit. Aussi nous introduisons un paramètre réel positif t et nous considérons l'opérateur:

$$(0.3) \quad P_t(h) = \sum_{j=1}^n (ih\partial_{x_j} - tA_j)^2 + V(x).$$

Nos résultats seront valables uniformément pour $t \in [-t_0, t_0]$ avec $t_0 > 0$ assez petit.

Pervenuto alla Redazione il 17 Febbraio 1987.

Après l'étude du problème à un puits dans l'esprit de [HE - SJ]₁, nous étudierons le splitting entre les 2 premières valeurs propres en présence d'un champ magnétique, et mettrons en évidence des effets propres liés à la présence du champ magnétique.

La démarche étant voisine du cas $t = 0$, nous mettrons surtout l'accent sur les points nouveaux: décroissance des fonctions propres, calcul de l'interaction, et passerons plus vite sur d'autres points.

La théorie développée ici a sûrement des applications à l'étude semi-classique de l'équation de Schrödinger avec potentiel périodique et champ magnétique. Nous espérons revenir sur cette question ultérieurement.

1. - Décroissance des fonctions propres et applications

Comme dans [HE-SJ]₁, l'étude spectrale va dépendre du contrôle des fonctions propres en dehors de $V^{-1}(]-\infty, 0])$ associées à des valeurs propres dans $I(h)$. Remarquons tout d'abord que le théorème 1.1 de [HE-SJ]₁ admet la généralisation immédiate suivante:

THÉORÈME 1.1. *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un domaine borné à frontière C^2 . Soit $V \in C^0(\overline{\Omega}, \mathbb{R})$ et $\phi \in \text{Lip}(\overline{\Omega}, \mathbb{R})$. Alors, pour tout $u \in C^2(\overline{\Omega}, \mathbb{R})$ avec $u/\partial\Omega = 0$, nous avons:*

$$(1.1) \quad \int_{\Omega} \|\nabla_{tA}^h(e^{\phi/h}u)\|^2 dx + \int_{\Omega} (V - |\nabla\phi|^2)e^{2\phi/h}u.\bar{u} dx \\ = \text{Re} \int_{\Omega} e^{2\phi/h}(P_t(h)u).\bar{u} dx$$

où $P_t(h)$ est introduit en (0.3) et

$$\nabla_{tA}^h v = h\nabla v + itAv.$$

Le Théorème (1.1) a les mêmes conséquences que dans le cas sans potentiel magnétique (§2 de [HE - SJ]₁) et nous rappelons brièvement les énoncés que l'on obtient ainsi:

Supposons donc que:

$$(1.2) \quad V^{-1}(]-\infty, 0]) = \bigcup_j U_j$$

où les U_j sont disjoints, compacts, de diamètre nul pour la distance d_V associée à la métrique d'Agmon $V + dx^2$.

Soit $S > 2S_o$ où:

$$(1.3) \quad S_o = \inf_{k \neq j} d_V(U_j, U_k).$$

Pour tout $\eta > 0$ assez petit, on introduit:

$$(1.4) \quad M_j^\eta = \overset{\circ}{B}(U_j, S) \cap C(\bigcup_{k \neq j} B(U_k, \eta))$$

où les boules $B(U_j, \delta)$ sont prises pour la distance d'Agmon.

Soit $I(h)$ un intervalle défini comme précédemment, et supposons qu'il existe $a(h) > 0$ t.q.

$$(1.5) \quad |\text{Log } a(h)| = o(1/h), h \rightarrow 0.$$

On désigne par $P_{t, M_j^\eta}(h)$ la réalisation de Dirichlet dans M_j^η et on désigne par

$\lambda_1^t, \dots, \lambda_{M_t}^t$ les valeurs propres de $P_t(h)$ contenues dans $I(h)$

$\mu_{j,1}^t, \dots, \mu_{j,m_j}^t$ les valeurs propres de $P_{t, M_j^\eta}(h)$ contenues dans $I(h)$

$u_i^t \in L^2(\mathbb{R}^n), \varphi_{j,k}^t \in L^2(M_j)$ un système orthonormé de fonctions propres correspondant.

Rappelons qu'on a des majorations du nombre de valeurs propres de la forme:

$$(1.6) \quad M^t + m_1^t + \dots + m_N^t = O(h^{-N_0})$$

où 0 est uniforme par rapport à $t \in [-t_0, t_0]$.

Ceci résulte en effet dans le cas de M^t de l'estimation (1.4) de [C - S - S] se déduisant de l'inégalité de Kato [KA]₁ qui donne l'existence de N_0 tel que le nombre de valeurs propres dans $]-\infty, \lambda]$ avec $\lambda < \lim_{|x| \rightarrow \infty} V$ est inférieur à

Ch^{-N_0} avec C indépendant de t .

Notons que, comme dans [HE] ou [HE - MA - RO], on déduit des résultats de [HE - RO] (dans le cas où A et V ont des propriétés de type symbole à l'infini) et des résultats sur la décroissance des fonctions propres que nous obtiendrons ensuite et qui ne dépendent que de (1.6), que l'on a le:

THÉORÈME 1.2. Soit $V \in C^\infty$ semi-borné, $\vec{A} \in C^\infty$ alors, pour tout $\lambda < \lim_{|x| \rightarrow \infty} V$, on a:

$$N_h(P^t, \lambda) \stackrel{\text{def}}{=} \{\#\lambda_j^t(h); \lambda_j^t(h) < \lambda\} = h^{-n} \left(\int_{\xi^2 + V(x) < \lambda} dx d\xi + O(h) \right)$$

où 0 peut être choisi uniforme par rapport à $t \in [-t_0, t_0]$ et $\lambda_j^t(h)$ désigne la suite des valeurs propres de $P_t(h)$. λ est supposée ici valeur non critique de V .

Ce résultat est obtenu avec ou bien un moins bon reste et l'impossibilité de contrôler l'uniformité en t dans [C - S - S] et sous des hypothèses additionnelles dans [HE - RO].

Un théorème analogue est annoncé par Ivrii [IV] #

Pour les problèmes de Dirichlet, on compare avec le problème global et on remarque que $N_h(P_{M_j}^t, \lambda) \leq N_h(P^t, \lambda)$ ce qui termine la démonstration de (1.6).

Rappelons maintenant les résultats sur la décroissance des fonctions propres:

LEMME 1.3 (cf. [HE - SJ]₁). Soit $\phi_j(x) = d_V(x, U_j)$ (pour $x \in M_j$). Alors, pour tout $\varepsilon > 0$, nous avons:

$$(1.7) \quad \|\nabla(e^{\phi_j(x)/h} \varphi_{j,k}^t)\|_{L^2(M_j)} + \|e^{\phi_j(x)/h} \varphi_{j,k}^t\| = O(e^{\varepsilon/h})$$

uniformément par rapport à $t \in [-t_o, t_o]$.

LEMME 1.4 (cf. [HE - SJ]₁). Soit $\phi(x) = \min_j d(x, U_j)$. Alors, pour tout $\varepsilon > 0$, nous avons

$$(1.8) \quad \|\nabla(e^{(1-\varepsilon)\tilde{\phi}(x)/h} u_k^t)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} + \|e^{(1-\varepsilon)\tilde{\phi}/h} u_k^t\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} = O(e^{\varepsilon/h}), \quad h \rightarrow 0$$

uniformément par rapport à $t \in [-t_o, t_o]$.

Supposons maintenant (ce qui sera vérifié dans notre cas) que:

$$(1.9) \quad m_j^t(h) = m_j(h)$$

et que

$$(1.10) \quad P_t(h), P_{t,M_j}(h) \text{ n'a pas de spectre dans les intervalles } [\alpha(h) - 2a(h), \alpha(h) \text{ [et] } \beta(h), \beta(h) + 2a(h)]$$

alors on a le:

LEMME 1.5 (cf. [HE - SJ]₁). Il existe une bijection $b(\eta, t, h)$ de $SpP_t(h) \cap I(h)$ sur $\bigcup_1^N (SpP_{t,M_j}(h) \cap I)$ telle que

$$b(\eta, t, h)(\lambda) - \lambda = O(e^{-S_o/h + \varepsilon(\eta)/h})$$

où 0 est uniforme par rapport à t et $\varepsilon(\eta) \rightarrow 0$ lorsque $\eta \rightarrow 0$.

Jusqu'ici, tout semble strictement identique au cas sans champ magnétique et dans le cas de plusieurs puits, on pronostique que les effets tunnel vont provoquer des écarts (pour les valeurs propres) de l'ordre de $O(e^{-S_o/h})$ dans le cas où des symétries laissaient présager (dans le cadre classique) des valeurs propres multiples (exemple du double puits symétrique). Le problème est que ceci n'est qu'une majoration de l'effet tunnel qui pourrait être plus petit (ou même nul!). Une des premières questions est donc de savoir si les fonctions propres $\varphi_{j,k}^t$ (dont le comportement le long des géodésiques minimales entre les puits jouait un rôle essentiel dans les cas $t = 0$) décroissent effectivement comme $h^{-N_o} e^{-\phi_j(x)/h}$, ou si elles décroissent plus vite.

L'étude du modèle:

$$(ih\partial_{x_1} - t\frac{x_2}{2})^2 + (ih\partial_{x_2} + t\frac{x_1}{2})^2 + (x_1^2 + x_2^2)$$

dont les fonctions propres sont de la forme $P_{t,k}(\frac{x}{\sqrt{h}})e^{-\frac{\sqrt{1+t^2/4}}{h}\frac{(x_1^2+x_2^2)}{2}}$ où $y \rightarrow P_{t,k}(y)$ est un polynôme, montrent que celles-ci décroissent dans certains cas plus vite pour $|t| \neq 0$.

Les techniques développées dans ce paragraphe ne semblent pas pouvoir être améliorées pour contrôler la décroissance (sauf dans le cas où V est invariant par rotation et qu'on prend (en dimension 2) un champ magnétique B constant). Ceci nous conduira à considérer des cas où t est petit, avec l'espoir de conclure par des techniques de perturbation en t . On sera ainsi obligé pour obtenir des résultats optimaux

- ou bien d'ajouter des hypothèses d'analyticité sur V et A près des géodésiques minimales pour d_V entre les puits et de supposer $|t| < t_o$ avec $t_o > 0$ assez petit;

- ou bien, sans hypothèse d'analyticité sur V , de choisir $t_o(h)$ avec $t_o(h) \rightarrow 0$ avec $h \rightarrow 0$ (comme $-Ch \log 1/h$ (cf. 2.40)).

2. - Constructions pres d'un minimum strict de V

On suppose dans tout le paragraphe que:

$$(2.1) \quad \begin{aligned} V^{-1}([-\infty, 0]) &= \{x_o\} = 0 \\ V'(0) &= 0, V''(0) \text{ défini positif.} \end{aligned}$$

$$(2.2) \quad x_o \in \Omega \text{ et } \lim_{\substack{|x| \rightarrow \infty \\ x \in \Omega}} V > 0$$

Ω est un ouvert à bord C^∞ ou $\mathbb{R}^n$.

L'étude du spectre en fond de puits est essentiellement analogue à celle des §3 et 4 de [HE - SJ]₁, aussi n'indiquerons-nous que les étapes essentielles et les points différents.

L'opérateur considéré a, cette fois-ci, comme symbole:

$$(2.3) \quad p_t(x, \xi) = \sum_j (\xi_j - tA_j)^2 + V(x).$$

Equation éiconale

Dans [HE - SJ]₁, pour mieux cerner ce qui se passe dans la région classiquement interdite, on introduit le symbole

$$(2.4) \quad q_t(x, \xi) = -p_t(x, i\xi) = \sum_j (\xi_j + itA_j)^2 - V(x).$$

Le fait nouveau est que $q_t(x, \xi)$ n'est plus réel pour $t \neq 0$. C'est réellement un problème dès que $\vec{A}$ n'est pas le gradient d'une fonction $\varphi \in C^\infty$ réelle.

Dans [HE - SJ]₁, il y a essentiellement 2 étapes; une première où l'on travaille dans le formel (en puissances de x). Celle-ci permet de localiser le spectre modulo $\mathcal{O}(h^\infty)$ et passe sans trop de problèmes au cas qui nous intéresse ici. La 2ème étape est la construction de solutions B-K-W dans le cas C^∞ ou dans le cas analytique. Seule la construction dans le cas analytique subsistera.

Dans la suite, nous travaillerons simultanément ou dans le cadre:

$$(2.5)_1 \quad V \text{ et } A \text{ sont des séries formelles}$$

ou

$$(2.5)_2 \quad V \text{ et } A \text{ sont holomorphes au voisinage de } 0.$$

Par diagonalisation de $V''(0)$, et en changeant éventuellement de jauge: $A \rightarrow A + \nabla\varphi$, on peut supposer que:

$$(2.6) \quad V(x) = \sum_1^n \lambda_j x_j^2 + \mathcal{O}(|x|^2)$$

$$(2.7) \quad A_j(x) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n b_{jk} x_k + \mathcal{O}(|x|^2) \text{ avec } b_{jk} \text{ antisymétrique.}$$

On obtient ainsi:

$$(2.8) \quad q_t(x, \xi) = \sum_j (\xi_j + i \frac{t}{2} \sum_k b_{jk} x_k)^2 - \sum_j \lambda_j x_j^2 + \mathcal{O}(|x, \xi|^3)$$

et le champ hamiltonien est donné par

$$(2.9) \quad H_{q_t} = 2 \left[\sum_j (\xi_j + i \frac{t}{2} \sum_k b_{jk} x_k) \partial_{x_j} + \sum_j [\lambda_j x_j - \sum_k (\xi_k + i \frac{t}{2} \sum_\ell b_{k\ell} x_\ell) \frac{it}{2} b_{kj}] \partial_{\xi_j} \right] + \mathcal{O}(|x, \xi|^2).$$

Le flot s'annule en 0 et la matrice fondamentale est donnée par:

$$(2.10) \quad F_t = 2 \begin{bmatrix} \frac{-itB}{2} & I \\ \text{diag}(\lambda_j) - \frac{t^2}{4} B^2 & \frac{-itB}{2} \end{bmatrix}.$$

Pour $t = 0$ (cf. [HE - SJ]), les valeurs propres sont données par $\pm 2\sqrt{\lambda_j}$ et les espaces propres correspondant aux valeurs propres positives (resp. négatives) sont données par:

$$(2.11) \quad \Lambda_{\pm}^0 : \xi_j = \pm \sqrt{\lambda_j} x_j$$

qu'on écrit sous la forme $\xi = \pm \phi'(x)$ avec $\phi(x) = \frac{1}{2} \sum_j \sqrt{\lambda_j} x_j^2$.

On peut alors construire 2 Lagrangiennes $\Lambda_{\pm}$ telles que

$$(2.12) \quad T_{(o,o)}(\Lambda_{\pm}) = \Lambda_{\pm}^0 \text{ et } H_q \text{ est tangente à } \Lambda_{\pm}$$

contenues dans $q_o^{-1}(0)$ et définies au voisinage de C à l'aide d'une fonction génératrice holomorphe ψ_o :

$$(2.13) \quad \Lambda_{\pm} : \xi = \pm \psi_o'(x) \quad x \in \mathcal{V}(\mathcal{V} \text{ vois. de } 0 \text{ dans } \mathbb{C}^n).$$

Dans ce cas, ψ_o est réelle pour x réel, et la construction marche dans le cadre C^∞ (ψ_o étant C^∞); dans le cas $t \neq 0$, nous allons perdre cette dernière propriété et nous nous contenterons alors du formel.

On a le:

LEMME 2.1. Soit $V(x) \sim \sum_{|\alpha| \geq 2} V_\alpha x^\alpha$ (resp. V holomorphe au voisinage de 0 admettant le même développement) vérifiant 2.6 et

$$\vec{A}(x) \sim \sum_{|\alpha| \geq 1} \vec{a}_\alpha x^\alpha$$

(resp. A holomorphe au voisinage de 0 admettant le même développement) vérifiant 2.7

alors il existe $t_o > 0$ tel que pour $t \in [-t_o, t_o]$

il existe $\psi_t(x) \sim \sum_{|\alpha| \geq 2} \psi_{\alpha,t} x^\alpha$ (resp. $\psi_t(x)$ holomorphe)

telle que:

$$(2.14) \quad q_t(x, \psi_t'(x)) = 0$$

$$(2.15) \quad \psi_t(x)_{/t=0} = \psi_o(x)$$

$$(2.16) \quad \text{Re } \psi_t''(0) \text{ définie positive.}$$

si on pose

$$(2.17) \quad \Lambda_+^t = \{\xi = \psi_t'(x)\}, \quad \Lambda_-^t = \{\xi = -\overline{\psi_t'(\bar{x})}\}$$

Λ_+^t et Λ_-^t sont des Lagrangiennes formelles (resp. holomorphes) contenues dans $q_t^{-1}(0)$ telles que H_{q_t} est tangent à Λ_+^t et à Λ_-^t .

REMARQUE 2.2. On a $\overline{\psi'_t(\bar{x})} = \psi'_{-t}(x)$ d'où

$$\Lambda_-^t = \{\xi = -\psi'_{-t}(x)\}.$$

DÉMONSTRATION. Dans le cas formel, on réfèrera à [HE - SJ] § 1 et dans le cas holomorphe, la démonstration de [SJ]₂ (Appendice) s'adapte au cas considéré ici (avec dépendance holomorphe par rapport à t). On se contente d'expliciter une partie "formelle" des calculs qui sera utile dans la suite.

a) *Etude du cas homogène en x .*

Cette situation est largement décrite dans une famille d'articles consacrés à l'hypoellipticité: J. Sjöstrand, L. Boutet de Monvel - F. Trèves, L. Boutet de Monvel - A. Grigis - B. Helffer, L. Hörmander... (cf. le livre de L. Hörmander [HÖ] et ses références).

Remarquons tout d'abord que, en notant $V = \text{diag}(\lambda_j)$, la matrice fondamentale $\frac{F_t}{2}$ a même spectre que les matrices hermitiennes:

$$(2.18) \quad \begin{pmatrix} -itB & \pm V^{1/2} \\ \pm V^{1/2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Il suffit en effet de conjuguer par la matrice

$$U_{\pm} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ \mp i \frac{V^{-1/2}}{2} B & \pm i V^{-1/2} \end{pmatrix}.$$

on en déduit facilement que ses valeurs propres sont réelles, de la forme $\pm \mu_j(t)$ avec

$$(2.19) \quad \begin{cases} \mu_j(t) > 0 \\ \mu_j(t) = \mu_j(-t) \\ \mu_j(0) = \sqrt{\lambda_j} \end{cases}$$

Un petit calcul de perturbation (sur la forme 2.18) montre que la trace "plus" $\sum_{j=1}^n \mu_j(t)$ qui détermine la première valeur propre de l'opérateur approximant au 1er ordre le fond du puits:

$$\sum_j (i\partial_{x_j} - \frac{t}{2} \sum_k b_{jk} x_k)^2 + \sum_j \lambda_j x_j^2$$

vérifie:

$$(2.20) \quad \text{Tr}^+ \left(\frac{F_t}{2} \right) = \sum_j \sqrt{\lambda_j} + \frac{t^2}{2} \sum_{j < k} \frac{|b_{j,k}|^2}{\sqrt{\lambda_j} + \sqrt{\lambda_k}} + \mathcal{O}(t^4).$$

On détermine la partie quadratique $\frac{1}{2} Q^t$ de la phase $\psi_t(x)$ en la cherchant sous

la forme d'un développement en puissance de t :

$$(2.21) \quad Q^t = Q_0 + itQ_1 + t^2Q_2 + \dots$$

avec Q_1 symétrique et

$$(2.22) \quad Q_0 = \frac{1}{2} \sum_j \sqrt{\lambda_j} x_j^2.$$

L'équation (2.14) s'écrit:

$$(2.23) \quad (Q_t - i\frac{t}{2}B)(Q_t + i\frac{t}{2}B) = V$$

soit en développant en puissances de t

$$(2.24) \quad \begin{cases} Q_0^2 = V \\ (Q_1 - B/2)Q_0 + Q_0(Q_1 + B/2) = 0 \\ -(Q_1 - \frac{B}{2})(Q_1 + \frac{B}{2}) + Q_0Q_2 + Q_2Q_0 = 0 \\ \dots \text{etc} \dots \end{cases}$$

L'existence de Q_t pour t petit est une conséquence du théorème des fonctions implicites pour la fonction $g(Q, t)$:

$$\text{Sym}(n, \mathbb{C}) \times \mathbb{R} \ni (Q, t) \rightarrow f(Q, t) - V \in \text{Sym}(n, \mathbb{C})$$

avec

$$f(Q, t) = (Q - i\frac{t}{2}B)(Q + i\frac{t}{2}B)$$

dont l'application tangente $(\frac{\partial g}{\partial Q})$ est donnée par

$$A \rightarrow AQ_0 + Q_0A$$

qui est bijective sur $\text{Sym}(n, \mathbb{C})$.

Q^t dépend holomorphiquement de t et la résolution de (2.24) donne:

$$(2.25) \quad \begin{cases} Q_0 = V^{1/2} = \text{diag}(\sqrt{\lambda_j}) \\ (Q_1)_{ij} = \frac{1}{2} b_{ij} \frac{(\sqrt{\lambda_i} - \sqrt{\lambda_j})}{\sqrt{\lambda_i} + \sqrt{\lambda_j}} \\ (Q_2)_{ij} = + \sum_{\ell} \left(\frac{b_{i\ell} \sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\lambda_i} + \sqrt{\lambda_\ell}} \right) \frac{1}{\sqrt{\lambda_i} + \sqrt{\lambda_j}} \left(\frac{b_{j\ell} \sqrt{\lambda_j}}{\sqrt{\lambda_\ell} + \sqrt{\lambda_j}} \right) \\ \dots \text{etc} \dots \end{cases}$$

On constate que $(Q_2)_{i,j}$ est positive, ce qu'on attendait, compte tenu des résultats sur la décroissance des fonctions propres, et du fait que les fonctions propres de

$$\sum_j (i\partial_{x_j} - \frac{t}{2} \sum_k b_{jk} x_k)^2 + \sum_j \lambda_j x_j^2$$

sont de la forme

$$P(t, x) \cdot e^{-Q^t(x)}$$

où $P(t, x)$ est un polynôme en x .

b) Cas non-homogène.

On se contente de résoudre modulo $\mathcal{O}(t^\infty)$. Le Lemme (2.1) affirme plus mais nous aurons besoin de cette version dans le cas C^∞ .

On cherche ψ_t sous la forme:

$$(2.26)_1 \quad \psi_t = \sum_k (it)^k \psi_k$$

où ψ_o est la solution (connue d'après [HE - SJ]₁) de

$$(2.26)_2 \quad q_o(x, \psi'_{ox}) = 0 \quad \psi_k \text{ est réelle}$$

et où on normalise en prenant:

$$(2.26)_3 \quad \psi_k(0) = 0.$$

On trouve l'équation:

$$(2.26)_4 \quad (\nabla \psi_t + itA)^2 = V$$

qui, en identifiant les puissances de t , donne les équations:

$$(2.27)_\ell \quad \sum_{\substack{k+j=\ell \\ k \geq 0, j \geq 0}} \vec{\Theta}_k \vec{\Theta}_j = \begin{cases} V & \text{si } \ell = 0 \\ 0 & \text{si } \ell > 0 \end{cases}$$

où

$$\begin{aligned} \vec{\Theta}_o &= \nabla \psi_o \\ \vec{\Theta}_1 &= \nabla \psi_1 + A \\ \vec{\Theta}_k &= \nabla \psi_k \quad \text{pour } k > 1; \end{aligned}$$

(2.27) se réécrit sous la forme:

$$\text{pour } \ell = 1 \quad 2\nabla \psi_o \cdot \nabla \psi_1 = -2\nabla \psi_o \cdot \vec{A}$$

pour $\ell > 1$
$$2\nabla\psi_o \cdot \nabla\psi_\ell = - \sum_{\substack{k+j=\ell \\ k>0, j>0}} \vec{\Theta}_k \vec{\Theta}_j.$$

On a vu (dans [HE - SJ]₁) que ce type d'équation se résout dans l'analytique (resp. dans C^∞) dès qu'elle se résout formellement, ce qui ne pose pas de problème particulier.

REMARQUE 2.3. Cette démonstration peut servir dans le cas où on impose $|t| \leq Ch^\delta$ avec $\delta > 0$, car elle conduit à la solution de l'équation eiconale module $O(h^\infty)$, même dans le cas C^∞ .

Nous gardons de toute cette discussion autour du Lemme 2.1 que

$$\begin{aligned} \psi_t(x) = & \sum \sqrt{\lambda_j} \frac{x_j^2}{2} + \frac{1}{4} \text{ it } \sum_{i,j} \frac{\sqrt{\lambda_i} - \sqrt{\lambda_j}}{\sqrt{\lambda_i} + \sqrt{\lambda_j}} \\ (2.28) \quad & + \frac{1}{2} t^2 \sum_{\ell} \sum_{i,j} \left(\frac{b_{i\ell} \sqrt{\lambda_i} x_i}{\sqrt{\lambda_i} + \sqrt{\lambda_\ell}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_i} + \sqrt{\lambda_j}} \right) \left(\frac{b_{j\ell} \sqrt{\lambda_j} x_j}{\sqrt{\lambda_j} + \sqrt{\lambda_\ell}} \right) \\ & + O(t^3 x^2) + O(x^3). \end{aligned}$$

On observe ici que le coefficient de t^2 est positif et que par conséquent

$$(2.29) \quad \text{Re } \psi_t(x) \geq \text{Re } \psi_o(x) - C(|t| + |x|)|x|^2.$$

Ceci règle le problème pour t assez petit et $|x|$ assez petit. En fait un examen direct de l'équation eiconale montre que:

$$(2.30) \quad (\nabla \text{Re } \psi_t)^2 = V + (\nabla \text{Im } \psi_t + tA)^2.$$

Re ψ_t est au moins au voisinage de 0 la distance d'Agmon associée au potentiel

$$V + (\nabla \text{Im } \psi_t + tA)^2$$

et par conséquent, on a:

$$(2.31) \quad \text{Re } \psi_t \geq \text{Re } \psi_o.$$

Construction B.K.W.

On distinguera 3 cas:

- B.K.W. formel
- B.K.W. holomorphe
- B.K.W. C^∞ mais avec $|t| \leq Ch^\rho$, $\rho > 0$.

Notons que pour localiser les valeurs propres modulo $O(h^\infty)$, la première construction est suffisante (hyp. V et A sont C^∞). L'hypothèse (V et A

holomorphes) permettra de localiser modulo $\mathcal{O}(e^{-\epsilon_0/h})$. Mais nous aurons besoin également de comparer les constructions B.K.W. avec les vraies fonctions propres et la troisième construction pourrait être utile. Notons d'ailleurs que si $|t| \leq Ch$ alors [HE - SJ]₁ s'applique tel que même dans le cas C^∞ .

Montrons comment on raccroche avec la théorie du §3 de [HE - SJ]₁. On fait d'abord un changement de coordonnées formel ou holomorphe (lemme de Morse) de sorte que, dans ces nouvelles coordonnées, on a:

$$\tilde{\psi}_t(x) = \frac{1}{2}x^2.$$

Ceci correspond dans $\mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n$ à une transformation canonique complexe $\tilde{K}_t$ qui envoie les 2 Lagrangiennes ($\xi = +i\psi'_t$ et $\xi = -i\psi'_t(\bar{x})$) sur les Lagrangiennes $\xi = \pm ix$ dans les nouvelles coordonnées.

Puis on utilise la technique de [HE - SJ]₁ en composant avec la transformation K_f introduite dans cet article (cf. les arguments autour de 3.11 dans [HE - SJ]₁).

$K_f \circ \tilde{K}_t$ est quantifiée par la transformation de F.B.I.:

$$(T_t u)(x, h) = h^{-n/2} C_n \int e^{\frac{i}{h} f(x, \theta_t(y))} b_t(x, y, h) u(y) dy$$

avec $f(x, z) = \frac{i}{2}(x - z)^2 - \frac{i}{4}x^2$ où: $b_t(x, y, h) = 1 + \mathcal{O}(t)$ est un symbole analytique (ou formel) à déterminer et où l'intégrale est à prendre sur un voisinage V de 0 (ou en un sens formel par un théorème de la phase stationnaire formel).

La transformation canonique envoie

$$\Lambda_t^+ \text{ sur } \xi = 0$$

$$\Lambda_t^- \text{ sur } x = 0$$

et $\mathbb{R}^{2n}$ sur une variété I-Lagrangienne déterminée par:

$$\xi = \frac{2}{i} \frac{\partial \phi_t}{\partial x}$$

où ϕ_t est une petite perturbation de ϕ_0 .

La transformation de F.B.I. T_t envoie $S^{m,k} e^{-\frac{\psi_t}{h}}$ sur $S^{m,k}$ (par des développements de phase stationnaire). On aimerait maintenant trouver b_t de telle sorte que T_t soit formellement unitaire de $L^2(\mathbb{R}^n)$ sur les germes de fonctions holomorphes en 0 muni du produit scalaire de $L^2(L(dx); e^{-2\phi_t(x)/h})$. Pour cela, on écrit T_t sous la forme T_1^t . A_t où A_t est un o.p.d. analytique et T_1^t est l'opérateur obtenu en prenant $b_t(x, y, h) = 1$.

Suivant les calculs de [HE - SJ]₁ (p. 366), on obtient

$$(T_1^t u_1 | T_1^t u_2)_{\phi_t} = h^{-3n/2} c \int \overline{\tilde{u}_2(\bar{x}, h)} C_t(x, h D_x, h) \tilde{u}_1(x, h) dx \text{ où } C_t(x, h D_x, h)$$

est un o.p.d. formellement autoadjoint proche de l'identité pour t assez petit;

choisissant A_t autoadjoint tel que $A_t^2 \equiv C_t^{-1}$, on obtient que $T_t = T_1^t A_t$ est unitaire (et classiquement, on peut le réécrire sous la forme où on a écrit T_t).

Dans tout ce qui précède nous sommes restés vagues sur la caractère formel ou pas des opérations. Tout ceci est justifié comme dans [HE - SJ]₁ par la théorie de J. Sjöstrand [SJ].

A ces remarques près, les §3 et 4 de [HE - SJ]₁ restent valides dans le cadre formel (sous les hypothèses C^∞) ou analytique (sous les hypothèses analytiques).

Nous sommes maintenant en mesure d'énoncer les principaux résultats dont les démonstrations découlent des §3 et 4, compte tenu des remarques qui précèdent.

Le premier résultat est celui qui se déduit de l'approximation quadratique.

PROPOSITION 2.4 (niveau fondamental). *On suppose que V est C^∞ et que les hypothèses (2.1) et (2.2) sont vérifiées. Alors la réalisation de Dirichlet dans Ω de $P_t(h)$ admet comme première valeur propre:*

$$(2.32) \quad \lambda_1^t(h) = h \frac{Tr^+ F_t}{2} + O(h^{3/2})$$

où $\frac{Tr^+ F_t}{2}$ est définie en (2.20) et O est uniforme par rapport à $t \in [-t_o, t_o]$.

DÉMONSTRATION. Il suffit de faire les calculs pour l'approximation quadratique.

On a vu que: $\frac{Tr^+ F_t}{2} \geq \frac{Tr^+ F_o}{2} = \Sigma \sqrt{\lambda_j}$

Ceci correspond aux résultats classiques de J. Avron - I. Herbst - B. Simon [A - H - S] et B. Simon [SI]₁ disant que le niveau fondamental monte lorsque on introduit un champ magnétique.

Le fait qu'on fait une erreur d'ordre $O(h^{3/2})$ en comparant avec l'approximation quadratique est démontré dans [HE - SJ]₁ et chez [SI]₂ (on a en fait $O(h^2)$). On a des résultats analogues pour les niveaux non fondamentaux que nous omettons (voir Proposition 2.5).

PROPOSITION 2.5. *On prend les hypothèses de la Proposition (2.4) et on considère pour $t \in [-t_o, t_o]$ une valeur propre E_1^t simple dépendant continûment de t de $\Sigma_j (i\partial_{x_j} - \frac{t}{2} \Sigma_k b_{jk} x_k)^2 + \Sigma_i \lambda_j x_j^2$*

alors il existe un symbole $a_t(x, h)$ dans $S^{m, k}$ (cf. [HE - SJ]₁, p. 364 avec $\lambda = 1/h$), dépendant holomorphiquement de t pour $|t| \leq t_o$ et une valeur propre $E^t(h)$ admettant le développement:

$$E^t(h) \sim h E_1^t + \sum_{j \geq 2} h^j E_j^t$$

(E_j^t dépendant holomorphiquement de t) tel que:

$$(2.33) \quad (P^t(h) - E^t(h))(a_t e^{-\psi_t(x)/h}) \equiv 0$$

au sens des séries formelles en x et h .

COROLLAIRE 2.6. $\exists h_o, \exists t_o, \forall N, \exists C_N$ t.q. $\forall h \in]0, h_o], \forall t \in]-t_o, t_o[$, dans l'intervalle $[E_N^t(h) - C_N h^N, E_N^t(h) + C_N h^N]$ (avec $E_N^t(h) = \sum_{j \leq N} h^j E_j^t$) $P_{t,\Omega}(h)$ ait exactement une valeur propre.

DÉMONSTRATION. Elle est identique à celle de $[HE - SJ]_1$. La seule différence avec $[HE - SJ]_1$ est que $\psi_t(x)$ n'est qu'une série formelle en x . #

On détermine ainsi le spectre modulo $O(h^\infty)$ de la réalisation de Dirichlet de $P_t(h)$ dans Ω , au moins près du niveau fondamental.

Il serait intéressant de regarder le cas où $E_{o,t=0}^t$ est une valeur propre multiple.

Ceci ne pose pas de problèmes nouveaux à t fixé assez petit, mais nous n'avons pas contrôlé l'uniformité en t quand la multiplicité varie au voisinage de $t = 0$. Remarquons enfin que a_t et ψ_t étant formels, il n'est pas possible de décrire proprement les "vraies" fonctions propres par leur approximation B.K.W. comme on le faisait dans le cas $t = 0$ dans $[HE - SJ]_1$. On tournera cette difficulté, ou bien en supposant V et A analytiques, et $|t| \leq t_o$ avec t_o assez petit, ou bien en supposant des hypothèses: $|t| \leq Ch^\rho$ avec $\rho > 0$ assez grand.

Traisons tout d'abord le cas analytique. On suppose que V et A sont analytiques dans les domaines où on est intéressé à comparer la vraie fonction propre et son approximation B.K.W. ψ_t est une fonction holomorphe définie au voisinage de 0, mais peut être étendue comme dans $[HE - SJ]_1$ dans des voisinages des géodésiques minimales ouvertes entre 0 et un autre puits.

Alors a_t, E^t sont des symboles analytiques en h , dépendant holomorphiquement de $t \in B(0, t_o)$. Si $\tilde{a}_t$ et $\tilde{E}_t$ désignent des réalisations (cf. $[SJ]_1$) de ces symboles, on a la:

PROPOSITION 2.7 (cas analytique) (cf. Théorème 4.6 de $[HE - SJ]_1$). Avec les notations précédentes et les hypothèses de la Proposition 2.5, il existe $\varepsilon_o > 0, t_o > 0$ tels que: $\forall t \in [-t_o, t_o]$ on ait:

$$(2.34) \quad (P^t(h) - \tilde{E}^t(h))(\tilde{a}^t \cdot e^{-\psi_t(x)/h}) = O(e^{-\varepsilon_o/h}) e^{-\operatorname{Re} \psi_t(x)/h}$$

où O est uniforme par rapport à $t \in [-t_o, t_o]$.

Compte tenu du §1 (décroissance en $e^{-d_V(x)/h}$ des fonctions propres), on va améliorer ces résultats. Notons tout d'abord que, pour $|t| \leq t_o$ (quitte à modifier $t_o > 0$ et $\varepsilon_o > 0$), on peut réécrire (2.34) sous la forme:

$$(2.35) \quad (P^t(h) - E^t(h))(a^t e^{-\psi_t(x)/h}) = O(e^{-\varepsilon_o/h}) e^{-d_V(x)/h}$$

ce qui conduit (cf. Théorème 5.8 de $[HE - SJ]_1$) au corollaire suivant.

COROLLAIRE 2.8 (cas analytique). Sous les hypothèses de la Proposition (2.7), on peut normaliser une fonction propre $u^t(h)$ de $P_{t,\Omega}(h)$ associée à la valeur propre voisine (au sens du Corollaire 2.6) de $\tilde{E}^t(h)$ de telle sorte que, dans tout ouvert U tel que $\bar{U} \subset \Omega$ et tel que $\bar{U}$ soit saturé par les géodésiques

minimales pour d_V joignant un point de U à 0, on ait:

$$(2.36) \quad u^t(h) - h^{-n/4} \tilde{a}^t e^{-\psi_t/h} = O(e^{-d_V(x)/h - \epsilon_0/h})$$

où O est uniforme par rapport à t .

Si, de plus, on considère le niveau fondamental, alors quitte à restreindre $t_0 > 0$, $\tilde{a}^t$ est elliptique dans $\overline{U} \times [-t_0, t_0]$ i.e.

$$\tilde{a}^t \sim \Sigma a_j(t, x) h^j$$

et

$$(2.37) \quad a_0 \neq 0 \text{ dans } \overline{U} \times [t_0, t_0].$$

REMARQUE 2.9. Si $u^t(h)$ est fonction propre associée à $\lambda^t(h)$, $\overline{u^t(h)}$ est associée à $\lambda^{-t}(h)$ et on a donc pour une valeur propre simple: $\lambda^t(h) = \lambda^{-t}(h)$.

COROLLAIRE 2.10. $\forall U, \exists t_0 > 0$ t.q. $\forall t \in [-t_0, t_0]$

$$(2.38) \quad u^t(h)(x) = O(h^{-N_0}) e^{-Re\psi_t/h} \text{ dans } \overline{U}$$

et on a des estimations analogues pour les dérivées.

Compte tenu de (2.31), (2.38) améliore le résultat du §1, chaque fois que l'on aura l'inégalité stricte dans (2.31). Nous n'avions pas pu en effet démontrer directement cette estimation par les estimations d'énergie du §1. L'hypothèse d'analyticité a été essentielle pour obtenir cette amélioration.

(2.36) et (2.38) seront très importants pour déterminer les coefficients de la matrice d'interaction entre différents puits.

Dans le cas C^∞ , la situation est moins rose. On a cependant vu que l'on pouvait résoudre l'équation eiconale modulo $O(|t|^\infty)$. Pour construire une solution B.K.W., il faudra résoudre également les équations de transport (modulo $O(|t|^\infty)$) ce que l'on fera plus loin. Si $|t| < Ch^\rho$ ($\rho > 0$), cela conduit à des constructions modulo $O(h^\infty)$ si on prend une réalisation de la phase ψ_t (par un procédé du type Borel).

La deuxième contrainte pour avoir (2.38) est d'avoir la propriété

$$(2.39) \quad \frac{Re\psi_t}{h} \leq \frac{d_V}{h} - C \text{ Log } h$$

qui conduit à la condition (compte tenu du fait que le coefficient de t de ψ_t est imaginaire):

$$(2.40) \quad \frac{t^2}{h} \leq -C \text{ Log } h \text{ avec } C > 0.$$

Les notions de $O(h^\infty) e^{-\frac{d_V(x)}{h}}$ ou de $O(h^\infty) e^{-Re\psi_t/h}$ sont alors confondues et la théorie de [HE - SJ]₁ s'applique sans trop de problèmes.

Étudions donc brièvement comment on résout les équations de transport. On se déplace au niveau fondamental et on suit plutôt la démarche décrite dans [HE]. On garde t comme paramètre indépendant et on considère les différentes équations de transports obtenues en développant:

$$a^t(x, h) = a_o^t(x) + h a_1^t + \dots$$

On se contentera d'analyser les 3 premières en considérant les $a_i^t(x)$ comme des séries formelles en t à coefficients C^∞ .

Les équations sont obtenues en écrivant

$$(2.41) \quad -h^2 \Delta a^t + 2(\nabla \psi_t + itA)h \nabla a^t + h[\Delta \psi_t + it \operatorname{div} A]a^t \\ + (V - (\nabla \psi_t + itA)^2 - E(h))a^t \equiv O((|t| + |h|)^\infty)$$

La première est l'équation eiconale:

$$(2.42) \quad (V - (\nabla \psi_t + itA)^2) = O(|t|^\infty)$$

que nous avons résolue de (2.26) à (2.30).

La deuxième équation (correspondant au coefficient en h) consiste à trouver E_1^t (qui sera bien entendu celui de la Proposition 2.5) t.q.

$$(2.43) \quad 2(\nabla \psi_t + itA) \nabla a_o^t + (\Delta \psi_t + it \operatorname{div} A - E_1^t) a_o^t = O(|t|^\infty)$$

avec $a_o^t(0) = 1$ pour normaliser.

Notons tout de suite qu'une condition nécessaire est de prendre:

$$(2.44) \quad E_1^t = (\Delta \psi_t + it \operatorname{div} A)(0) \text{ (la formule est bien un invariant de jauge!)}$$

qui est bien une série formelle en t puisque ψ_t l'est.

(On a utilisé ici que $(\nabla \psi_t + itA)(0) = 0$).

Exercice: Vérifier la compatibilité de (2.44), (2.28) et (2.20).

Développons maintenant (2.43) en puissances de t et cherchons a_o^t sous la forme

$$(2.45) \quad a_{o,0} + it a_{o,1} - t^2 a_{o,2} + \dots \quad \text{avec } a_{o,j} \text{ réel!}$$

Rappelons que:

$$(2.46) \quad \psi^t = \psi_o + it \psi_1 - t^2 \psi_2 + \dots \quad \text{avec } \psi_j \text{ réel!}$$

On obtient ainsi les équations:

$$\begin{aligned}
 & 2\nabla\psi_o\nabla a_{o,o} + (\Delta\psi_o - E_o^1)a_{o,o} = 0 \\
 (2.47) \quad & 2\nabla\psi_o\nabla a_{o,1} + (\Delta\psi_1 + \operatorname{div} A - E_1^1)a_{o,o} + 2(\nabla\psi_1 + A)\nabla a_{o,o} = 0 \\
 & 2\nabla\psi_o\nabla a_{o,j} = \varphi_j(x, a_{o,o}, \dots, a_{o,j-1}, \nabla a_{o,o}, \dots, \nabla a_{o,j-1}) - E_1^j a_{o,o}
 \end{aligned}$$

et on impose les conditions initiales:

$$a_{o,o}(0) = 1, a_{o,j}(0) = 0.$$

Enfin, à chaque étape, on choisit (E_1^j) pour que le second membre s'annule en 0 (ce qui est écrit synthétiquement en (2.44)). Ces équations se résolvent terme à terme comme dans [HE - SJ]₁ (cf. plutôt [HE]) et on trouve ainsi la solution de (2.43).

REMARQUE 2.11. Le choix de a_t et ψ_t sous la forme (2.45) et (2.46) si on remarque (cf. Remarque 2.9) que si u est solution pour E^t , $\bar{u}$ est solution pour E^{-t} .

Etudions enfin la troisième équation (on laisse au lecteur le soin de résoudre de la même manière les suivantes):

$$(2.48) \quad \begin{cases} 2(\nabla\psi_t + itA)\nabla a_1^t + (\Delta\psi_t + it\operatorname{div} A - E_1^t)a_1^t = \Delta a_o^t + E_2^t a_o^t \\ a_1^t(0) = 0. \end{cases}$$

La condition pour résoudre est d'avoir:

$$(2.49) \quad E_2^t = -(\Delta a_o^t)(0);$$

On résout alors de manière analogue à la résolution de (2.43) (via (2.47)).

Le bilan de tous ces calculs peut se résumer dans la

PROPOSITION 2.12 (Cas C^∞). *Sous les hypothèses de la Proposition 2.4 et sous la condition (2.40), il existe un symbole $\tilde{a}^t(h)$ (réalisation d'un symbole série formelle en t et h à coefficient C^∞) et une normalisation de la première fonction propre de $P_{t,\Omega}(h)u_t(h)$ t.q.*

$$u^t(h)(x) - h^{-n/4} \tilde{a}^t e^{-\tilde{\psi}_t(x)/h} = \mathcal{O}(h^\infty) e^{-\operatorname{Re} \tilde{\psi}_t(x)/h} = \mathcal{O}(h^\infty) e^{-d_V(x)/h}$$

dans un ouvert U du type décrit en (2.36), de plus, $a_{o,o}(x)$ diffère de 0 dans $\bar{U}$.

3. - Calcul de la matrice d'interaction

On a vu au §2 comment traiter le problème à un puits. Nous allons maintenant revenir à la détermination du spectre dans le cas du plusieurs puits. On se donne donc un intervalle $I(h) \rightarrow 0$ et on suppose que:

$$V^{-1}(0) = \bigcup_{j=1}^N U_j$$

où les U_j sont des puits distincts, compacts et de diamètre nul pour la distance d'Agmon. On reprend les notations et les hypothèses du §1 (points (1.3) - (1.10)) et, pour ne pas avoir de problèmes en appliquant les résultats du §2, on supposera que:

$$(3.1) \quad m_i^t = 1$$

Ceci correspond à une seule valeur propre $\mu_i^t(h)$ dans l'intervalle $I(h)$ pour la réalisation de Dirichlet dans $M_i(\eta)$ et il est facile de voir que $\mu_i^t(h)$ dépend continûment de t (cf. [KA]₂). On obtient alors l'analogie du Théorème 2.9 de [HE - SJ]₁:

THÉOREME 3.1. *Sous les hypothèses précisées au début de ce paragraphe, le spectre de $P^t(h)$ dans l'intervalle $I(h)$ est donné modulo $\tilde{O}(e^{-2S_0/h})$ (c-à-d. modulo $O(e^{-2(S_0-\varepsilon(\eta))h})$ avec $\varepsilon(\eta) \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} 0$) par la matrice:*

$$(3.2) \quad \text{diag} (\mu_j^t) + \hat{W}_{j,k}^t$$

où

$$\hat{W}_{j,k}^t = \frac{1}{2}(W_{j,k}^t + \overline{W_{k,j}^t})$$

et

$$(3.3) \quad W_{j,k}^t = h \int \chi_j \left[\varphi_k^t \overline{\nabla_{tA}^h \varphi_j^t} - \nabla_{tA}^h \varphi_k^t \cdot \overline{\varphi_j^t} \right] \nabla \chi_k dx$$

où φ_j^t est une fonction propre normalisée de $P_{M_j(\eta)}$ associée à μ_j

χ_j est une fonction C^∞ égale à 1 sur $M_j(2\eta)$ et à support dans $M_j(3/2 \cdot \eta)$

et $\nabla_{tA}^t = h\nabla + itA$

DÉMONSTRATION. Elle est analogue au cas $t = 0$ et s'appuie sur la formule de Green.

REMARQUE 3.2. $\hat{W}_{jj}^t = \tilde{O}(e^{-2S_0/h})$.

Ceci résulte immédiatement du Lemme 1.2.

REMARQUE 3.3. La question est maintenant de savoir si on peut déterminer plus explicitement la matrice d'interaction $\hat{W}_{j,k}^t$ qui est de l'ordre de $\tilde{O}(e^{-\frac{d(U_j, U_k)}{h}})$.

Explicitons dans notre cas la remarque (2.13) de [HE - SJ]₁.
Supposons que $j \neq k$ soient donnés tels que:

$$(3.4) \quad d_V(U_j, U_k) = S_o$$

$$(3.5) \quad \mu_j^t - \mu_k^t = O(e^{-a/h}) \quad \text{pour un } a > 0 \text{ uniformément par rapport à } t;$$

alors

$$(3.6) \quad W_{jk}^t = \overline{W_{kj}^t} + \tilde{O}(e^{-S_o/h - a/h})$$

(même démonstration que dans le cas $t = 0$).

Cette propriété est en particulier vérifiée dès que:

$$(3.7) \quad \mu_j^t = \mu_k^t$$

ce qui résulte presque toujours de considérations de symétries:

LEMME 3.4. *Supposons qu'il existe une isométrie ϕ de $\mathbb{R}^n$ envoyant M_j sur M_k avec:*

$$(3.8) \quad \begin{aligned} V \circ \phi &= V \\ \phi_* A &= A + \nabla \Theta \quad \text{où } \Theta \text{ est une fonction } C^\infty. \end{aligned}$$

alors $P_{M_j(n)}^t$ et $P_{M_k(n)}^t$ sont unitairement équivalents. En particulier (3.7) est vérifiée.

REMARQUE 3.5. Un autre cas peut-être intéressant est celui où on a, à la place de (3.8):

$$(3.8)' \quad \begin{aligned} V \circ \phi &= V \quad \phi_* A = -A + \nabla \Theta \end{aligned}$$

On a alors l'existence de U unitaire tel que $U^{-1} \overline{P_{M_j}} U = P_{M_k}$.

REMARQUE 3.6. Si (3.7) est vérifiée, on a:

$$(3.9) \quad W_{jk}^t - \overline{W_{kj}^t}.$$

REMARQUE 3.7. Si Ω est un ouvert régulier contenant U_j et contenu dans CU_k et si $\Gamma = \partial\Omega \cap \{x, d(U_j, x) + d(U_k, x) \leq S_o + a\}$, on peut sous l'hypothèse

(3.5) obtenir par la formule de Stokes une expression analogue à celle de [HE - SJ]₁ (formule 2.25):

$$(3.10) \quad \begin{cases} W_{jk}^t = h \int_{\Gamma} \overline{\varphi_j^t} [h \frac{\partial}{\partial n} + itA \cdot n] \varphi_k^t - \overline{\varphi_k^t \cdot [h \frac{\partial}{\partial n} + itA \cdot n] \varphi_j^t} d\nu_{\Gamma} \\ + \tilde{O}(e^{-(S_o+a)/h}) \text{ (où } \tilde{O} \text{ est uniforme par rapport à } t) \end{cases}$$

où n est la normale à Γ orientée de U_j vers U_k et $\frac{\partial}{\partial n}$ est la dérivée normale. #
On suppose désormais que l'on peut travailler avec $I(h) = [0, Ch]$ où C est choisie de telle sorte que chacune des réalisations de Dirichlet $P_{M_i(\eta)}^t(h)$ relatives aux puits U_j qu'on suppose ponctuels et non dégénérés n'admette qu'une seule valeur propre.

Les potentiels V et A sont supposés analytiques dans un voisinage de $d(x, U_j) + d(x, U_k) \leq a + S_o$ (ou éventuellement si les potentiels sont seulement C^∞ , on restreindra t à un intervalle $|t| \leq C\sqrt{h \operatorname{Log} \frac{1}{h}}$).

Reprenant les constructions B.K.W. de fond de puits du §2, on peut, après éventuelle renormalisation, supposer que:

$$(3.11) \quad \varphi_j^t(x, h) = h^{-n/4} a_j^t(x, h) e^{-\psi_j^t(x)/h}$$

avec

$$(3.12) \quad a_j^t(x, h) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} a_{jk}^t(x) h^k$$

au sens des symboles analytiques (dans la catégorie analytique).

La fonction $\psi_j^t(x)$ est celle construite au §2 et a_{jo}^t est elliptique.

Rappelons que $\varphi_j^o(x) = d_V(x, U_j)$.

Cette approximation est justifiée dans un voisinage de Γ quitte à restreindre éventuellement Γ (c-à-d. $a > 0$) et $t_o > 0$.

Remettant (3.11) et (3.12) dans la formule (3.10), on obtient:

$$(3.13) \quad \begin{cases} \exists \varepsilon_o > 0, \exists t_o > 0 \text{ t.q. } \forall t \in [-t_o, t_o], \forall h \in]0, h_o] \\ W_{jk}^t = h^{1-n/2} \int_{\Gamma} \overline{a_j^t} a_k^t \left[\frac{\partial \psi_j^t}{\partial n} + 2itA \cdot n - \frac{\partial \psi_j^t}{\partial n} \right] e^{-\psi_j^t/h} d\nu_{\Gamma} \\ + h^{2-n/2} \int_{\Gamma} \left[-a_k^t \frac{\partial \overline{a_j^t}}{\partial n} + \overline{a_j^t} \frac{\partial a_k^t}{\partial n} \right] e^{-\psi_j^t/h} d\nu_{\Gamma} + O(e^{-\varepsilon_o/h - S_o/h}) \end{cases}$$

avec par définition:

$$(3.14) \quad \psi_{jk}^t = \overline{\psi_j^t(x)} + \psi_k^t(x).$$

Rappelons ici que $\psi_{jk}^o(x) = d(x, U_k) + d(x, U_k)$.

REMARQUE 3.8. Dans le cas C^∞ , il faut remplacer $O(e^{-s_0/h-S_0/h})$ par $O(h^\infty)e^{-S_0/h}$ et imposer la condition: $|t| \leq C\sqrt{h} \log \frac{1}{h}$.

Pour mesurer plus précisément l'ordre de grandeur de (3.13), notons (cf. 2.29) que:

$$(3.15) \quad \operatorname{Re} \psi_{jk}^t(x) \geq \operatorname{Re} \psi_{jk}^o(x) = \psi_{jk}^o(x) \geq S_o.$$

Il est intéressant de savoir si l'inégalité $\operatorname{Re} \psi_{jk}^t(x) \geq S_o$ est stricte pour tout $x \in \Gamma$ et de calculer l'expression de la différence $(\operatorname{Re} \psi_{jk}^t(x) - S_o)$ en développant en puissances de t .

Pour cela, revenons à l'étude de la fonction

$$(3.16) \quad \psi_j^t(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \psi_{jk}(x)(it)^k$$

et rappelons que $\psi_{j;2}(x)$ vérifie l'équation (2.27)₂

$$(3.17) \quad 2(\nabla \psi_{j;o})(x) \nabla \psi_{j;2}(x) = -(\nabla \psi_{j;1}(x) + A)^2.$$

On se place en un point x tel qu'il existe une unique géodésique minimale γ_j joignant x à U_j (on sera toujours, quitte à restreindre Γ , dans ce cas lorsque $x \in \Gamma$).

On omet provisoirement la référence à j et on montre le

LEMME 3.9. $\psi_2(x) = 0 \iff (\nabla \psi_o]B)$ est nul sur la géodésique minimale joignant x au puits U où

$$\begin{aligned} B &= \Sigma \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_k} - \frac{\partial A_k}{\partial x_j} \right) dx_j \wedge dx_k \\ \psi_o &= d(x, U). \end{aligned}$$

DÉMONSTRATION DU LEMME 3.9. On paramètre γ sur $] -\infty, 0]$ comme courbe intégrale de $\nabla \psi_o$ et on remarque alors que:

$$(3.18) \quad \psi_2(x) = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 |\nabla \psi_1^1 + A|^2(\gamma(s)) ds.$$

On a donc clairement:

$$(3.19) \quad \psi_2(x) = 0 \iff (\nabla \psi_1 + A) \equiv 0 \text{ sur la géodésique minimale } \gamma.$$

Compte tenu du fait que $(\nabla \psi_1 + A)$ s'annule au puits, on peut encore écrire que:

$$(3.20) \quad \psi_2(x) = 0 \iff \frac{d}{ds} (\nabla \psi_1 + A) \gamma(s) = 0 \quad \forall s \in] -\infty, 0].$$

Développons maintenant la condition de droite qui peut se réécrire:

$$(3.21) \quad \sum_j \frac{\partial \psi_o}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial \psi_o}{\partial x_j} \frac{\partial A_k}{\partial x_j} = 0 \text{ sur } \gamma.$$

Rappelons aussi (cf. (2.27)₁) que:

$$2\nabla \psi_o \cdot \nabla \psi_1 = -2\nabla \psi_o \cdot A$$

dont on déduit par dérivation:

$$(3.22) \quad \sum_j \frac{\partial^2 \psi_o}{\partial x_j \partial x_k} \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x_j} + A_j \right) + \sum_j \frac{\partial \psi_o}{\partial x_j} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x_j \partial x_k} + \sum_j \frac{\partial \psi_o}{\partial x_j} \frac{\partial A}{\partial x_k} = 0.$$

(3.21) est alors équivalent à:

$$(3.23) \quad \sum_j \frac{\partial \psi_o}{\partial x_j} B_{jk} \Big|_{\Gamma \text{Im} \gamma} + \sum_j \frac{\partial^2 \psi_o}{\partial x_j \partial x_k} \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x_j} + A_j \right) \Big|_{\Gamma \text{Im} \gamma} = 0.$$

On voit alors clairement que $(\partial \psi_1 / \partial x_j + A_j) = 0$ sur γ implique $(\nabla \psi_o \rfloor B) = 0$ sur γ . Inversement, on tombe sur l'équation:

$$\begin{cases} \frac{d}{ds} v_j(s) = - \sum_k \frac{\partial^2 \psi_o(\gamma(s))}{\partial x_j \partial x_k} v_k(s) \\ v_j(-\infty) = 0 \end{cases} \quad s \in]-\infty, 0]$$

avec $v_j(s) = (\nabla \psi_1 + A)_j(\gamma(s))$, dont l'unique solution est $v_j(s) = 0$ pour $j = 1, \dots, n$ sur $] -\infty, 0]$ compte tenu du fait que la matrice $\partial^2 \psi_o / \partial x_j \partial x_k(0)$ est non dégénérée positive.

Le Lemme 3.9 est démontré. #

PROPOSITION 3.10. *Cas d'une géodésique (cf. Th. 6.6 de [HE - SJ]₁).*

Supposons qu'il n'y a qu'une géodésique minimale entre U_j et $U_k : \gamma_{jk}$ et que $(\nabla \psi_{j,o} \rfloor B)_{\gamma_{jk}} = -(\nabla \psi_{k,o} \rfloor B)$ est non identiquement nul, alors il existe $t_o > 0, \alpha > 0, C > 0$ t.q. $\forall t \in [-t_o, t_o]$:

$$(3.25) \quad C e^{-\frac{S_o}{n}} e^{-\alpha \frac{t^2}{h}} \geq |w_{jk}^t|.$$

DÉMONSTRATION. Il suffit de remarquer que sur $\gamma_{jk} \cap \Gamma = x_{jk}$

$$\begin{aligned} \text{Re} (\bar{\psi}_j^t + \psi_k^t)(x_{jk}) &= S_o + \frac{1}{2} t^2 \int_{-\infty}^0 (\nabla \psi_j^1 + A)^2(\gamma_{jk}(s)) ds \\ &\quad + \frac{1}{2} t^2 \int_0^{+\infty} (\nabla \psi_k^2 + A)^2(\gamma_{jk}(s)) ds + 0(t^4). \end{aligned}$$

REMARQUE 3.11. On peut bien entendu se poser le problème de la minoration. Il est plus délicat que dans le cas $t = 0$. Si on regarde en effet la formule (3.13), dans un voisinage de x_{jk}

$$\bar{a}_j^t a_k^t \left(\frac{\partial \psi_k^t}{\partial n} + 2itAn - \frac{\partial \psi_j^t}{\partial n} \right)$$

reste près pour t petit de $-2a_j^o(x_{jk})a_k^o(x_{jk})\sqrt{V(x_{jk})}$ mais dans le terme $e^{-\psi_{jk}^t/h}$ une partie imaginaire apparaît qui peut provoquer des *annulations* dans l'intégrale et rendre le splitting plus petit. En particulier l'argument de W_{jk}^t qui est π pour $t = 0$ pourrait prendre d'autres valeurs.

Par ailleurs, s'il y a plusieurs géodésiques, des phénomènes de compensation pourraient se produire, conduisant à l'annulation de l'effet tunnel.

On va tâcher maintenant d'analyser ces phénomènes en cherchant des cas où l'on peut trouver un équivalent pour W_{jk}^t . #

PROPOSITION 3.12 (*Cas d'une géodésique*). On suppose qu'il n'y a qu'une géodésique γ_{jk} , que Γ coupe γ_{jk} transversalement en x_{jk} et que la restriction de $d(x, U_j) + d(x, U_k)$ à Γ s'annule exactement à l'ordre 2 en x_{jk} , alors, $\exists a > 0, \exists t_o > 0$ t.q. $\forall t \in [-t_o, t_o]$ où $b_{jk}^t(h)$ est un symbole analytique elliptique et le développement à l'ordre 2 de S_{jk}^t est calculable (cf. (3.32) et (3.33)).

En particulier $\exists C > 0, |W_{jk}^t| \geq Che^{-\text{Re } S_{jk}^t/h}$.

DÉMONSTRATION DE LA PROPOSITION 3.18. C'est une application du théorème de la phase stationnaire analytique. La phase est la fonction $\psi_{jk}^t(x)$ considérée comme fonction analytique sur Γ qu'on étend dans un voisinage complexe de même que l'amplitude: $c_{jk}^t(h, x)$

$$x \rightarrow c_{jk}^t(h, x) = \bar{a}_j^t(h, x) a_k^t(h, x) \left[\frac{\partial \psi_k^t}{\partial n} + 2itAn - \frac{\partial \psi_j^t}{\partial n} \right] \\ + h \left[-a_k^t \cdot \frac{\partial a_j^t}{\partial n} + \bar{a}_j^t \frac{\partial a_k^t}{\partial n} \right].$$

Avec ces notations, on remarque que

$$W_{jk}^t = \int_{\Gamma} e^{-\psi_{jk}^t(x)/h} c_{jk}^t(h, x) d\nu_{\Gamma}$$

et que $\text{Re } \psi_{jk}^t(x) \geq S_o + a$ sur $\partial\Gamma$ pour $t \in [-t_o, t_o]$ avec t_o assez petit.

On fait une déformation de contour pour passer par le point critique x_{jk}^t de $\Gamma^{\mathbb{C}}$ de $\psi_{jk}^t(x)$ (tel que $x_{jk}^o = x_{jk}$) dont l'existence est assurée par le théorème des fonctions implicites grâce à l'hypothèse faite sur le Hessien de la restriction à Γ de $\psi_{jk}^o(x) = d(x, U_j) + d(x, U_k)$.

Une application du Théorème (2.8) de [SJ] montre alors qu'on a (3.26) avec

$$(3.27) \quad S_{jk}^t = \psi_{jk}^t(x_{jk}^t).$$

Remarquons d'abord que:

$$(3.28) \quad \text{Arg } b_{jk}^t(h) = \pi + O(|t| + |h|)$$

$$(3.29) \quad \psi_{jk}^t(x_{jk}^t) = S_o + O(|t|).$$

On va maintenant s'efforcer de déterminer S_{jk}^t plus précisément en calculant x_{jk}^t puis $\psi_{jk}^t(x_{jk}^t)$ modulo $O(t^3)$.

Recherche des points critiques

Considérons, comme travail préliminaire, une famille de fonctions holomorphes de $B(0,1)(\mathbb{C})$ dans $\mathbb{C}$ dépendant holomorphiquement d'un paramètre complexe $t \in B(0, t_o)$ et tels que:

$$\rho_t(x) = \rho_o(x) + it\rho_1(x) + t^2\rho_2(x) + O(t^3)$$

avec ρ_1 réel pour x réel, $\rho_o(0) = 0, \rho'_o = 0, \rho''_o(0)$ défini positif, $\text{Re } \rho_o \geq 0$. Alors près de O la fonction $x \rightarrow \rho_t(x)$ admet un point critique

$$(3.30) \quad x_t = -it\rho''_o(0)^{-1} \cdot \rho'_1 + O(t^2)$$

et en ce point critique x_t , on a, pour t réel:

$$(3.31) \quad \begin{aligned} \text{Re } \rho_t(x_t) &= [-\rho_2(0) + \frac{1}{2}(\rho''_o(0)^{-1} \rho'_1(\rho'_1))]t^2 + O(t^4) \\ \text{Im } \rho_t(x_t) &= it\rho_1(0) + O(t^3). \end{aligned}$$

Si on applique ce petit calcul préliminaire à la fonction ψ_{jk}^t , on déduit de (3.31) (avec $\rho^t = \psi_{jk}^t - \psi_{jk}^o$ restreint à Γ):

$$(3.32) \quad \left\{ \begin{aligned} \text{Re } S_{jk}^t &= S_o + t^2[-\psi_j^2(x_{jk}) - \psi_k^2(x_{jk}) \\ &\quad + \frac{1}{2} < \nabla \psi_k^1 - \nabla \psi_j^1 | \rho''_o^{-1}(x_{jk}) | \nabla \psi_k^1 - \nabla \psi_j^1 >] \\ &\quad + O(t^4). \end{aligned} \right.$$

(Notons que la formule a un sens car $(\nabla \psi_k^1 + A)$ et $(\nabla \psi_j^1 + A)$ sont orthogonaux à λ_{jk} en x_{jk} d'après la formule (2.27)₁, et par conséquent $(\nabla \psi_k^1 - \nabla \psi_j^1)$ et

$$(3.33) \quad \text{Im } S_{jk}^t = t[\psi_k^1(x_{jk}) - \psi_j^1(x_{jk})] + O(t^3).$$

Ceci termine la démonstration de la proposition, mais il nous faut analyser plus soigneusement les formules (3.32) et (3.33) pour en tirer des informations plus précises.

Le premier point est la

PROPOSITION 3.13. *Sous les hypothèses de la Proposition 3.12, il existe $\alpha > 0$ t.q.:*

$$\operatorname{Re} S_{jk}^t \geq S_o + \alpha t^2 \quad \text{pour } |t| \leq t_o \text{ assez petit}$$

si et seulement si $(\nabla \psi_o|B)$ est non identiquement nul sur la géodésique minimale γ_{jk} joignant U_j à U_k .

Il suffit en effet de remarquer que le coefficient de t^2 de S_{jk}^t est somme de 3 termes positifs et que la nullité des 2 premiers implique la nullité du 3^{ème}.

La deuxième question naturelle est d'interpréter S_{jk}^t de manière plus intrinsèque et plus précisément les premiers coefficients des puissances de t . En particulier, on peut espérer vérifier plus directement l'indépendance par rapport au point x_{jk} . Il est clair, en effet, que S_{jk}^t est indépendant de x_{jk} , comme le montre par exemple (3.26) et la formule:

$$S_{jk}^t = \lim_{h \rightarrow 0} (-h) \operatorname{Log} (-W_{jk}^t)$$

en prenant la détermination principale du logarithme.

REMARQUE 3.14. Calcul de $\operatorname{Im} S_{jk}^t$.

On va calculer plutôt le coefficient de t : $\psi_k^1(x_{jk}) - \psi_j^1(x_{jk})$ et rappelons que x_{jk} est un point quelconque sur la géodésique minimale γ_{jk} entre U_j et U_k .

D'après (2.27)₁, on a (compte tenu de la normalisation (2.26)₃ choisie):

$$\begin{aligned} \psi_j^1(\gamma_{jk}(t)) &= - \int_{-\infty}^t \vec{\gamma}'_{jk}(s) \cdot \vec{A}(\gamma_{jk}(s)) ds \\ \psi_k^1(\gamma_{jk}(t)) &= - \int_{-\infty}^{-t} \vec{\gamma}'_{jk}(-s) \cdot \vec{A}(\gamma_{jk}(-s)) ds \\ &= + \int_t^{+\infty} \vec{\gamma}'_{jk}(s) \cdot \vec{A}(\gamma_{jk}(s)) ds. \end{aligned}$$

On obtient finalement le:

LEMME 3.15.

$$(3.34) \quad \operatorname{Im} S_{jk}^t = \operatorname{Circ} (A, \gamma_{jk}) t + \mathcal{O}(t^3)$$

où $\operatorname{Circ} (A, \gamma_{jk})$ est la circulation de A le long de γ_{jk} .

Cette formule n'est pas un invariant de jauge car la normalisation (2.26)₃ n'est pas invariante par changement de jauge! #

Il serait également intéressant d'avoir une expression élégante pour

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{\operatorname{Re} S_{jk}^t - S_0}{t^2} \right).$$

REMARQUE 3.16. *Lien avec une intégrale d'action*

Reprenons formellement les calculs qui précèdent pour retrouver les intégrales d'action qu'utilisent les physiciens (cf. [WI]).

Soit donc:

ψ_j^t la phase relative à U_j ; $\phi_j^t = i\psi_j^t$

ψ_k^t la phase relative à U_k , $\phi_k^t = i\psi_k^t$; $\tilde{\phi}_k^t(x) = \overline{\phi_k^t(\bar{x})}$

$\Lambda_{\phi_j^t} = \{(x, \xi) \text{ t.q. } \xi = \phi_j^t(x)\}$

$\Lambda_{\tilde{\phi}_k^t} = \{(x, \xi) \text{ t.q. } \xi = \tilde{\phi}_k^t(x)\}$

ϕ_j^t et $\tilde{\phi}_k^t$ vérifie pour $p^t(x, \xi) = (\xi - tA)^2 + V$:

$$(3.35) \quad \begin{cases} p(x, \phi_j^t) = 0 \\ p(x, \tilde{\phi}_k^t) = 0. \end{cases}$$

La recherche du point critique $(x_{jk}^t) \in \Gamma_{\mathbf{C}}$ revient à chercher les points critiques de $\varphi_j - \tilde{\varphi}_k / \Gamma_{\mathbf{C}}$ c-à-d. vérifiant:

$$(3.36) \quad \nabla_{\Gamma_{\mathbf{C}}} \varphi_j = \nabla_{\Gamma_{\mathbf{C}}} \tilde{\varphi}_k.$$

Compte tenu de (3.35), le point critique est à l'intersection de $\Lambda_{\phi_j^t}$ et $\Lambda_{\tilde{\phi}_k^t}$ qui se coupent le long d'une courbe complexe $\gamma_t(s)$; si on choisit une courbe $\mathbb{R} \ni s \rightarrow \hat{\gamma}_t(s)$ dans cette intersection, joignant U_j et U_k , par exemple celle parcourue par les x_{jk}^t quand on fait varier Γ , on peut considérer l'intégrale d'action

$$(3.37) \quad I(t) = \int_{\hat{\gamma}_t} \xi dx$$

et il est clair que

$$\begin{aligned} I(t) &= \int_{-\infty}^0 \frac{d}{ds} (\varphi_j^t(\hat{\gamma}_t(s))) + \int_0^{\infty} \frac{d}{ds} (\varphi_k^t(\hat{\gamma}_t(s))) ds \\ &= \varphi_j^t(x_{jk}^t) - \varphi_k^t(x_{jk}^t) \\ &= i[\psi_j^t(x_{jk}^t) + \psi_k^t(x_{jk}^t)] = iS_{jk}^t \end{aligned}$$

d'où

$$(3.38) \quad I(t) = iS_{jk}^t.$$

Par la formule de Stokes, on en déduit que

$$(3.39) \quad \dot{I}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma\left(\frac{\partial \hat{\gamma}}{\partial t}, H_{p^t}\right) ds$$

et en particulier que:

$$(3.40) \quad \begin{aligned} \dot{I}(0) &= \psi_k^1(x_{jk}) - \psi_j^1(x_{jk}) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma\left(\frac{\partial \hat{\gamma}}{\partial t}\Big|_{t=0}, H_{p_0}\right) ds \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle dp^0 \Big| \frac{\partial \hat{\gamma}}{\partial t}\Big|_{t=0} \right\rangle (\gamma_0(s)) ds. \end{aligned}$$

Si on se rappelle que $p^t(\hat{\gamma}_t(s)) = 0$, on obtient que $\frac{\partial p^t}{\partial t}(\hat{\gamma}) + dp \cdot \frac{\partial \hat{\gamma}_t}{\partial t} = 0$ et par conséquent:

$$(3.41) \quad \begin{aligned} \dot{I}(0) &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial p^t}{\partial t}\right)(\gamma_0(s)) ds \\ \dot{I}(0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\gamma}_{jk}(s) \cdot A \, ds. \end{aligned}$$

On retrouve au moins formellement (3.34). #

REMARQUE 3.17. Dans le cas où V et A sont seulement C^∞ , on peut donner un sens à la formule (3.26), sous réserve de mettre la condition $|t| \leq C\sqrt{h} \cdot \sqrt{\log 1/h}$;

$$W_{jk}^t = hb_{jk}^t(h)e^{-S_{jk}^t/h} + O(h^\infty)e^{-S_0/h}$$

où $b_{jk}^t(h), S_{jk}^t$ sont des réalisations des séries formelles en (t, h) : il suffit en effet d'appliquer un théorème de la phase stationnaire formel.

4. - Applications à l'étude du "splitting" des valeurs propres

On reprend les hypothèses considérées en (3.5). On suppose ici qu'on a 2 puits U_1 et U_2 non dégénérés et qu'il existe une isométrie ϕ de $\mathbb{R}^n$ sur $\mathbb{R}^n$ telle que:

$$(4.1) \quad \phi^2 = I$$

$$(4.2) \quad V \circ \phi = V$$

$$(4.3) \quad \phi_* A = A + \nabla \Theta \text{ pour une fonction } \Theta \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$$

$$(4.4) \quad \phi(U_1) = U_2.$$

remarquons tout d'abord qu'en remplaçant A par $\frac{1}{2}(\phi_* A + A)$ qui est équivalent par transformation de jauge ($\frac{1}{2}(\phi_* A + A) - A = \nabla \frac{\Theta}{2}$), on peut remplacer (4.3) par:

$$(4.3)' \quad \phi_* A = A.$$

On suit maintenant de près les calculs de [HE - SJ]₂. Dans la base "adaptée", la matrice 2×2 permettant de déterminer les 2 premières valeurs propres proches de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique (fond de puits) est une matrice continue par rapport à t comme cela résulte d'arguments classiques du Chapitre VIII de [KA], hermitienne et commutant avec de matrice $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ de l'action naturelle de ϕ dans l'espace propre considéré.

$$(4.5) \quad \begin{pmatrix} \lambda(t, h) & \alpha(t, h) \\ \alpha(t, h) & \lambda(t, h) \end{pmatrix}$$

avec, compte tenu des remarques précédentes et des calculs du paragraphe 3:

$$(4.6) \quad \alpha(t, h) \in \mathbb{R} \text{ et dépend continûment de } t$$

$$(4.7) \quad \lambda(t, h) = \lambda_o^t(h) + \tilde{O}(e^{-2S_o/h}) \text{ pour } t \in [-t_o, t_o], t_o > 0.$$

$$(4.8) \quad \alpha(t, h) = W_{12}^t + O(e^{-S_o/h - a/h}) a > 0$$

où W_{12}^t est le coefficient d'interaction introduit au §3 (cf. (3.3), (3.9) et (3.10) à partir des fonctions.

$$(4.9) \quad \varphi_1^t \text{ fonction propre normalisée du problème de Dirichlet dans } M_1 \\ \text{associée à la valeur propre } \lambda_D^t(h)$$

$$\varphi_2^t = \varphi_1^t \circ \phi^{-1}.$$

En général, nous pouvons discuter 3 cas

- a) $\alpha(t, h) < 0$
- b) $\alpha(t, h) = 0$
- c) $\alpha(t, h) > 0$.

Le cas a) est celui qu'on a pour $t = 0$ (cf. [HE - SJ]₁), la plus petite valeur propre est $(\lambda(t, h) + \alpha(t, h))$ et correspond à un état symétrique de coordonnées (1,1) dans la base adaptée.

Le cas b) correspondrait à une racine double, ce qui est exclu a priori dans le cas sans champ magnétique, mais ce qui est possible a priori dans le cas d'un champ magnétique (cf. [A.H.S]).

Le cas c) est également spécifique du champ magnétique (s'il existe?). Le plus basse valeur propre correspondrait en effet à une fonction propre antisymétrique (pour ϕ) qui s'annulerait sur les points fixes de l'isométrie.

Notons que l'existence du cas c) implique l'existence du cas b), compte tenu de la continuité par rapport à t de $\alpha(t, h)$ et du fait que $\alpha(0, h) < 0$. On va maintenant montrer par des exemples que toutes ces situations peuvent effectivement se produire sous des hypothèses convenables.

Cas d'une géodésique

On suppose qu'il existe une seule géodésique minimale γ_{12} non dégénérée entre les 2 puits.

On a alors nécessairement $\phi(\gamma_{12}) = \gamma_{12}$. Comme ϕ échange les 2 puits, ϕ a nécessairement un point fixe sur γ_{12} .

ϕ étant une isométrie de $\mathbb{R}^n$, c'est une matrice orthogonale (de carré 1 car $\phi^2 = I$). Quitte à changer de coordonnées, on peut supposer que $O \in \gamma_{12}$ et on peut prendre comme hypersurface Γ un ouvert dans un hyperplan Σ invariant par ϕ transverse à γ_{12} .

Ce cas ne conduit à rien de nouveau en ce sens qu'on a (prop. 3.12):

$$|W_{12}^t| > h e^{-\text{Re } S_{12}^t/h} \text{ et } W_{12}^t|_{t=0} < 0.$$

On a de plus $\alpha(t, h) < 0$ pour $t \in [-t_o, t_o]$ avec t_o assez petit.

Le seul effet observé est donc une diminution de l'effet tunnel dû à l'existence du champ magnétique dans le cas où $\text{Re } S_{12}^t > S_o$.

Cas de deux géodésiques

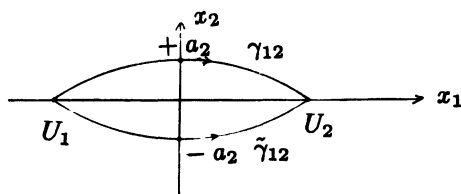
On suppose qu'il existe deux géodésiques minimales γ_{12} et $\tilde{\gamma}_{12}$ non dégénérées entre les 2 puits et que:

$$\phi \text{ échange les 2 géodésiques } \gamma_{12} \text{ et } \tilde{\gamma}_{12}.$$

On se contente de traiter un cas où la dimension est $n = 2$ et où ϕ est la symétrie par rapport à 0.

$$\phi = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On suppose que $U_1 = (-a_1, 0)$ $U_2 = (a_1, 0)$ et on prend comme Σ l'hypersurface $x_1 = 0$



Modulo $\mathcal{O}(e^{-(S_0+a)/h})$ avec $a > 0$, $W_{1,2}^t$ est la somme de 2 contributions conjuguées l'une de l'autre avec:

$$(4.10) \quad W_{1,2}^t = W_{1,2}^{t(\gamma)} + W_{1,2}^{t(\tilde{\gamma})}$$

et

$$(4.11) \quad \overline{W_{1,2}^{t(\gamma)}} = W_{1,2}^{t(\tilde{\gamma})}$$

(Comme conséquence du caractère réel de $W_{1,2}^t$).

De plus $W_{1,2}^{t(\gamma)}$ est donnée par la formule:

$$(4.12) \quad W_{1,2}^{t(\gamma)} \equiv h^2 \int_{|x_2 - a_2| < \epsilon} [\overline{\varphi_1^t(0, x_2)} \frac{\partial \varphi_1^t}{\partial x_1}(0, -x_2) + \varphi_1^t(0, -x_2) \frac{\partial \overline{\varphi_1^t}}{\partial x_1}(0, x_2)] \\ dx_2 + [2iht] \int_{|x_2 - a_2| < \epsilon} A_1(0, x_2) \overline{\varphi_1^t(0, x_2)} \varphi_1^t(0, -x_2) dx_2.$$

$W_{1,2}^t$ est réel et on peut écrire:

$$(4.13) \quad W_{1,2}^{t,\gamma} = 2|W_{1,2}^{t,\gamma}| \cos(\text{Arg } W_{1,2}^{t,\gamma}).$$

$W_{1,2}^{t,\gamma}$ se calcule à l'aide de la Proposition 3.12, mais ce qui nous intéresse le plus est de connaître le signe de $W_{1,2}^t$ et par conséquent d'étudier $\text{Arg } W_{1,2}^{t,\gamma}$. En effet $\alpha(t, h)$ aura sûrement le même signe que $W_{1,2}^t$ dès que:

$$\frac{\pi}{2} + \varepsilon_o < \text{Arg } W_{1,2}^{t,\gamma} < \frac{3\pi}{2} - \varepsilon_o \text{ avec } \varepsilon_o > 0 \text{ (indépendant de } h).$$

En effet, compte tenu de la minoration de $|W_{1,2}^{t,\gamma}|$, le reste ne pourra modifier le signe.

Or, on a d'après la Proposition 3.12

$$(4.14) \quad \text{Arg } W_{1,2}^t = \frac{\text{Im } S_{12}^{t,\gamma}}{h} + O(|h| + |t|)$$

et d'après (3.34)

$$(4.15) \quad \text{Im } S_{1,2}^{t,\gamma} = t \text{ Circ } (A, \gamma_{12}) + O(t^3).$$

Compte tenu du fait que, compte tenu des symétries

$$(4.16) \quad \text{Circ } (A, \gamma) = -\text{Circ } (A, \tilde{\gamma})$$

on obtient en désignant par $\Sigma(\gamma, \tilde{\gamma})$ la surface intérieure γ et $\tilde{\gamma}$:

$$(4.17) \quad \text{Circ } (A, \gamma) = \frac{1}{2} \int_{\Sigma(\gamma, \tilde{\gamma})} B$$

$$\text{avec } B = \left(\frac{\partial A_1}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_1} \right) dx_1 \wedge dx_2.$$

On voit que dès que la condition

$$(4.18) \quad \int_{\Sigma(\gamma, \tilde{\gamma})} B \neq 0$$

est satisfaite, on peut obtenir en faisant varier (t, h) avec $0 < |t| < t_o$ (t_o dépendant de h dans le cas C^∞), $h \in]0, h_o]$ n'importe quel argument pour $W_{1,2}^{t,\gamma}$. En particulier, pour un t voisin de $t_k(h)$ défini par

$$(4.19) \quad t_k(h) = \frac{2(k + \frac{1}{2})\pi h}{\int_{\Sigma} B} \quad (k \in \mathbb{Z}).$$

On aura une valeur propre double. #

REMARQUE 4.1. Cet effet semble nouveau mais il est du même type que celui apparaissant dans l'article non rigoureux de Aharonov - Bohm [AH - BO].

REFERENCES

- [AH - BO] Y. AHARONOV - D. BOHM, *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*. The Physical Review vol. 115 (3), Aug. 1959.

- [A - H - S] J. AVRON - I. HERBST - B. SIMON, *Schrödinger Operators with Magnetic Fields*.
 [1] *General Interactions*. Duke Math. J. vol. 45 (4), Déc. 1978.
 [2] *Separation of Center of Mass in Homogeneous Magnetic Fields*. Ann. Physics 114, pp. 431-451 (1978).
 [3] *Atoms in Homogeneous Magnetic Fields*. Comm. Math. Phys. 79 pp. 529-572 (1981).
- [C - S - S] J-M. COMBES - R. SCHRADER - R. SEILER, *Classical Bounds and Limits for Energy Distributions of Hamilton Operators in Electromagnetic Fields*. Ann. Physics 111, pp. 1-18 (1978).
- [HE] B. HELFFER, *An introduction to Semi Classical Analysis for the Schrödinger Operator*. Cours en Chine. (A paraître Lecture Notes in Mathematics 1988).
- [HE - RO] B. HELFFER - D. ROBERT, *Calcul Fonctionnel Admissible et Applications*. J. Funct. Anal. 53 (3) (1983), pp. 246-268.
- [HE - SJ] B. HELFFER - J. SJÖSTRAND, *Multiple Wells in the Semi-Classical Limit*
 [1] Comm. in P.D.E., 9 (4) (1984), pp. 337-408.
 [2] *Interaction Moléculaire, Symétries, perturbation*: Ann. Inst. H. Poincaré, vol. 42 (2) (1985), pp. 127-212.
- [HE - MA - RO] B. HELFFER - A. MARTINEZ - D. ROBERT, *Ergodicité et Limite Semi-classique* (Comm. Math. Phys.).
- [HO] L. HÖRMANDER, *The Analysis of Linear Partial Differential Equations*. Tome 3, Chap. XXII - Springer.
- [HU] W. HUNZIKER, *Schrödinger Operators with Electric or Magnetic Fields*. Proc. Int. Conf. in Math. Phys., Lausanne (1980).
- [IV] I.V. IVRII - Note au C.R.A.S. 1986, 302 Sér I (13), pp. 467-471.
- [KA] T. KATO:
 [1] Israel J. Math. 13 (1972) pp. 125-174.
 [2] *Perturbation Theory for Linear Operators*. Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften 132. Springer Verlag.
- [ME - SJ] A. MENIKOFF - J. SJÖSTRAND. *On the Eigenvalues of a class of hypoelliptic Operators*. Math. Ann. 235, pp. 55-85 (1978).
- [MO] A. MOHAMED.
- [SI] B. SIMON:
 [1] Indiana Univ. Math. J. 26, pp. 1067-1073 (1977).
 [2] *Semi-Classical Analysis of Low Lying Eigenvalues I*. Ann. Inst. H. Poincaré t. 38 (1983), pp. 295-307.
 [3] *Semi-Classical Analysis of Low Lying Eigenvalues II. Tunneling*. Ann. of Math. (1984) vol. 20, pp. 89-118.
- [SJ] J. SJÖSTRAND:
 [1] *Singularités analytiques microlocales* - Astérisque 95 (1982).

- [2] *Analytic Wave front Sets and Operators with Multiple Characteristics* Hokkaido Math. Journal Vol. XII (3), pp. 392-433.

[WI]

M. WILKINSON, *Narrowly avoided crossings* Preprint April 1986.

Ecole Polytechnique
Centre de Mathématiques
Plateau de Palaiseau
91128 PALAISEAU Cedex
France

Département de Mathématiques
Université Paris-Sud
91405 ORSAY Cedex
France