Séminaire Équations aux dérivées partielles - École Polytechnique

J. Sjöstrand

# Puits multiples (d'après des travaux avec B. Helffer)

*Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)* (1983-1984), exp. nº 7, p. 1-16

<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1983-1984____A7_0>

© Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (École Polytechnique), 1983-1984, tous droits réservés.

L'accès aux archives du séminaire Équations aux dérivées partielles (http://sedp.cedram.org) 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/

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

CENTRE DE MATHÉMATIQUES

91128 PALAISEAU CEDEX - FRANCE

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

SEMINAIRE GOULAOUIC-MEYER-SCHWARTZ 1983-1984

# PUITS MULTIPLES

(d'après des travaux avec B. Helffer)

par J. SJÖSTRAND

Exposé n° VII

13 Décembre 1983

## INTRODUCTION

Dans cet exposé on décrira les résultats de [3 - 5]. Le travail de Harrell [2] sur les problèmes à deux puits est peut-être celui qui nous a inspiré le plus au départ, bien que le résultat final de nos efforts n'en garde que très peu de traces et se rapporte plutôt à la méthode L.C.A.O. des chimistes.
D'autres travaux nous ont stimulés par la suite, notamment ceux d'Agmon [1], de Jona-Lasinio, Martinelli, Scoppola [6], et de B. Simon [9],[10]. Voir [4],[5] pour une bibliographie plus complète.

Pour simplifier un peu l'exposé on se placera toujours sur une variété riémannienne compacte $M$ de dimension $n$, mais tous les résultats dans la suite restent valables aussi dans le cas $M = \mathbb{R}^n$ à quelques modifications près, et on donnera aussi quelques exemples dans ce cas.

Soit $V \in C^\infty(M;\mathbb{R})$ et posons $P = -h^2\Delta + V$, où $h \in J$ et $J \subset ]0,1]$ est un ensemble avec $0 \in \bar{J}$, et où $\Delta$ est le laplacien sur $M$. On désigne aussi par $P$ la réalisation autoadjointe de $P$ dans $L^2(M)$. Le spectre de $P$ est discret et le but de cet exposé est de décrire quelques résultats "fins" sur le comportement des valeurs propres de $P$ près de $0$ lorsque $h \to 0$.

On suppose que

$$V^{-1}(]-\infty,0]) = U_1 \cup \ldots \cup U_N \,, \tag{0.1}$$

où les $U_j$ sont compacts et disjoints. Si $dx^2$ est la métrique sur $M$ on introduit la métrique d'Agmon $\max(V,0)\,dx^2$, qui fut employée par Agmon [1] dans un problème un peu différent et ensuite par B. Simon [10] dans le cadre présent. Si $d$ est la distance (dégénérée) associée à cette métrique, on supposera dans la suite que chaque $U_j$ est de diamètre $0$ pour $d$. (C'est une hypothèse de connexité). Pour $\eta > 0$ petit, soit $B(U_j,\eta) = \{x \in M\,;\, d(x,U_j) < \eta\}$ et

$$M_j = M \setminus \bigcup_{k \neq j} B(U_k,\eta) \,. \tag{0.2}$$

(Si $\partial M_j$ n'est pas $C^\infty$ dans (0.2) on "modifie la définition très légèrement"! ).

Soit $P_{M_j}$ la réalisation de $P$ dans $L^2(M_j)$ avec condition de Dirichlet. $P_{M_j}$ est autoadjoint et son spectre ; $S_p\, P_{M_j}$ est discret. Soit $I(h)$ , $h \in J$ un intervalle compact qui tend vers $\{0\}$ quand $h \to 0$ , tel qu'il existe une fonction $a(h) > 0$ avec

$$(0.3) \qquad |\log a(h)| = o(1/h) \quad , \quad h \to 0 \quad ,$$

(0.4) $P , P_{M_1} , \ldots , P_{M_N}$ n'ont pas de valeurs propres dans $(I(h) + [-a(h) , a(h)]) \setminus I(h)$ , $h \in J$ .

Dans la suite on considère que $S_p(P_{M_j}) \cap I(h)$ et les fonctions propres correspondantes sont assez bien connus. Le problème est alors de trouver un lien entre ces quantités et le spectre de $P$ .

## 1. DECROISSANCE EXPONENTIELLE DU NOYAU DE LA RESOLVANTE.

Soit $K_h \subset \mathbb{C}$ , $h \in J$ un compact qui tend vers $\{0\}$ quand $h \to 0$. Si $S_j = \min_{k \neq j} d(U_k , U_j)$ et $a_j \in [0, 2S_j[$ on suppose que pour tout $\eta > 0$ suffisamment petit

$$(1.1) \qquad \operatorname{dist}(K_h, S_p(P_{M_j})) \geqslant \frac{1}{C_\varepsilon} e^{-(a_j+\varepsilon)/h} \quad ,$$

pour tout $\varepsilon > 0$. (De manière équivalente, il suffit de supposer (1.1) pour un choix de $\eta$ avec $a_j < 2(S_j - \eta)$).

Soit $\mathcal{D}'_a$ la matrice $N \times N$ : $((1 - \delta_{j,k}) \exp -(d(U_j,U_k) - \frac{a_j}{2} - \frac{a_k}{2})/h)$ et $T_a(y)$ la matrice $N \times 1$ : $(\exp - (d(U_j,y) - a_j/2)/h)$. Alors on a le

<u>Théorème 1.1 ([4])</u>. <u>Si on suppose</u>

$$(1.2) \qquad d(U_j,U_k) - a_j/2 - a_k/2 > 0 \quad , \quad \forall\, j \neq k \ ,$$

<u>alors pour</u> $z \in K_h$ et $h \in J$ <u>suffisamment petit</u>, $(P-z)^{-1}$ <u>existe et son noyau est</u>

$$(1.3) \qquad \hat{\mathcal{O}}(e^{-d(x,y)/h} + {}^t T_a(x)(I + \mathcal{D}'_a + \ldots + (\mathcal{D}'_a)^{N-1}) T_a(y)))$$

<u>uniformément pour</u> $z \in K_h$.

Ici on utilise la terminologie suivante : Si $f \in C^{\circ}(M \times M ; \mathbb{R})$ et $A_h \in \mathcal{L}(L^2(M), H^1(M))$ une famille d'opérateurs, on dit que le noyau de $A_h$ est $\hat{\mathcal{O}}(e^{-f(x,y)/h})$ si pour tous $x_o, y_o \in M$, $\varepsilon > 0$, il existe des voisinages $V$, $U$ de $x_o$ et $y_o$ respectivement et une constante $C > 0$ tels que

$$\| Au \|_{H^1(V)} \leqslant C\, e^{-(f(x_o,y_o)-\varepsilon)/h} \| u \|_{L^2(U)} \quad , \quad \forall\, u \in L^2(M) \cap \mathcal{E}'(U) .$$

Par $\hat{\mathcal{O}}(\sum_1^k e^{-f_j/h})$ on entend $\hat{\mathcal{O}}(\exp-(\min f_j)/h)$.

Dans le cas non-résonnant : $a_j = 0$, $\forall j$, l'estimation (1.3) se réduit à $\hat{\mathcal{O}}(e^{-d(x,y)/h})$ et cette estimation joue un rôle important dans la démonstration du théorème 2.2 ci-dessous. Dans le cas général, si l'on écrit (1.3) sous la forme $\hat{\mathcal{O}}(e^{-F(x,y)/h})$, alors pour $x$ et $y$ en dehors de la réunion des boules $B(U_j, a_j/2)$, on peut décrire $F(x,y)$ comme le infimum de la somme des longueurs des chemins parcourus en dehors de cette réunion, quand on relie $y$ à $x$ par une courbe $C^1$, de toutes les manières possibles.

## 2. MATRICE D'INTERACTION, PREMIERS EXEMPLES

Soient $S_p(P_{M_j}) \cap I(h) = \{\mu_{j,1}, \dots \mu_{j,m_j}\}$, $S_p(P) \cap I(h) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_M\}$ et $\varphi_{j,1}, \dots, \varphi_{j,m_j} \in L^2(M_j)$, $u_1, \dots, u_M \in L^2(M)$ des systèmes orthonormaux associés. Alors par des inégalités $L^2$ avec poids on montre (dans l'esprit d'Agmon [1] que pour tout $\varepsilon > 0$ :

$$\varphi_{j,k}\,,\, \nabla\varphi_{j,k} = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(d(U_j,x)-\varepsilon)/h}) \tag{2.1}$$

$$u_j\,,\, \nabla u_j = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-\min_k d(U_k,x)/n + \varepsilon/h}) \tag{2.2}$$

uniformément sur $M_j$ et $M$ respectivement.

L'estimation (2.2) est due à B. Simon [10].

Avec $\alpha = (j,k)$ on écrira $j(\alpha) = j$. Soit $\theta_k \in C_o^\infty(B(U_k,2\eta))$ égale à 1 dans un voisinage de $\overline{B(U_k,\eta)}$ et soit $\chi_j = 1 - \sum_{k\neq j} \theta_k$, $\psi_\alpha = \chi_{j(\alpha)} \varphi_\alpha$.

Si $S_o = \min_{j\neq k} d(U_j,U_k)$, on a la

Proposition 2.1 [3]). Soient $F,E \subset L^2(M)$ les espaces engendrés par les $u_j$ et les $\psi_\alpha$ respectivement. Alors pour $h \in J$ assez petit, $\dim E = \dim F$ et la distance entre E et F (qui se définit de manière naturelle) est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_o/h})$. De plus, il existe une bijection $b : \{\mu_\alpha\} \to \{\lambda_j\}$ telle que $b(\lambda) - \lambda = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_o/h})$.

Ici par définition, une quantité est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_o/h})$, $h \to 0$ si elle est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_o-\varepsilon(\eta))/h})$ où $\varepsilon(\eta) \to 0$ quand $\eta \to 0$.

On pose $\mathcal{D}' = \mathcal{D}'_0$ (voir section 1). Voici le résultat principal :

Théorème 2.2 ([4]) : Soit $\pi_F$ le projecteur orthogonal sur F et $v_\alpha = \pi_F(\psi_\alpha)$, $V = ((v_\alpha|v_\beta))$. Alors $V = I + \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}' + \mathcal{D}'^2)$. La matrice de $P|_F$ par rapport à la base orthonormalisée $\vec{e} = \vec{v}\, V^{-1/2}$ est de la forme

$$A = \mathrm{diag}(\mu_\alpha) + \hat{W} + R \quad , \quad R = \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3) \ , \tag{2.3}$$

où $\hat{W} = (\hat{W}_{\alpha,\beta})$, $\hat{W}_{\alpha,\beta} = \frac{1}{2}(W_{\alpha,\beta} + W_{\beta,\alpha})$,

$$W_{\alpha,\beta} = (1 - \delta_{j(\alpha),j(\beta)})h^2 \int \chi_{j(\alpha)}(\varphi_\beta \nabla\varphi_\alpha - \varphi_\alpha \nabla\varphi_\beta)\nabla\chi_{j(\beta)}\, dx \ , \tag{2.4}$$

avec $\hat{W} = \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}')$.

Ici par exemple " $R = \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3)$" signifie que $R_{\alpha,\beta} = \tilde{\mathcal{O}}((\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3)_{j(\alpha),j(\beta)})$ pour chaque composante $R_{\alpha,\beta}$ de R.

Remarque 2.3 : Dans [3] nous avions obtenu ce théorème avec la majoration du reste plus faible : $R = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h})$. Cette majoration suffit dans beaucoup de cas, comme nous le verrons dans cette section, mais se révèle insuffisante dans des cas "d'interaction moléculaire".

Remarque 2.4 : Le Théorème devient intéressant dans des cas où on sait "résoudre" le problème spectral pour chaque puits. En dimension 1, ce problème est particulièrement abordable et beaucoup de méthodes s'appliquent. En dimension supérieure le problème est largement ouvert, mais un cas que l'on peut traiter presque complètement est celui des basses valeurs propres quand chaque puits est un point avec $V''(U_j) > 0$. Si $p = \xi^2 + V(x)$ est le symbole principal de $P$ (au sens des opérateurs h-peudodifférentiels) on pose $q(x,\xi) = \xi^2 - V(x) = -p(x,i\xi)$. Le champ hamiltonien $H_q$ de $q$ s'annule alors dans chaque point $(U_j,0)$ et les valeurs propres de son linéarisé sont de la forme $\pm\lambda_1^{(j)},\ldots,\pm\lambda_n^{(j)}$ où $0<\lambda_1^{(j)}\leqslant\lambda_2^{(j)}\leqslant\ldots\leqslant\lambda_n^{(j)}$. D'autre part, on peut associer à $(P,U_j)$ un oscillateur harmonique dont les valeurs propres sont de la forme $(\lambda_1^{(j)}+\ldots+\lambda_n^{(j)})/2+\sum_1^n \alpha_k\lambda_k^{(j)}$, $\alpha_k\in\mathbb{N}$.

Les valeurs propres de $P_{M_j}$ dans un intervalle $[0,Rh]$ ont alors des développements asymptotiques de la forme $\sim h\,E(h)$, où $E(h)\sim E_0+E_{1/2}h^{1/2}+E_1h+\ldots$ et où $E_0$ est une valeur propre de l'oscillateur harmonique associé à $(P,U_j)$. (Voir B. Simon [9] et aussi [3]). Supposons (par exemple) que pour un développement asymptotique donné $E(h)$, nous ayons pour chaque $j$, exactement une valeur propre de $P_{M_j}$ ; $\mu_j=\mu_{j,1}$ avec $\mu_j\sim h\,E(h)$. Alors si $N_0\in\mathbb{N}$ est assez grand et $I(h)=[\,h\,E(h)-h^{N_0},\ h\,E(h)+h^{N_0}\,]$, les hypothèses du Théorème 2.2 sont vérifiées avec $m_j=1$. On sait aussi d'après [3]) que dans un voisinage de $U_j$ on peut écrire $\varphi_j=\varphi_{j,1}$ comme $b(x,\lambda)\,e^{-\lambda\psi(x)}$, $\lambda=1/h$, où $\psi(x)=d(x,U_j)$ est $C^\infty$ près de $U_j$ et $b$ a un développement asymptotique en $\frac{1}{2}$-puissances de $\lambda$. L'ordre $m_j$ du symbole $b$ peut facilement être calculé. Si les deux points $U_j$ et $U_k$ sont reliés par une géodésique minimale unique $\gamma$ (pour la métrique d'Agmon, on peut aussi traiter le cas d'un nombre fini de telles géodésiques) et si $\gamma$ évite les autres puits et réalise un minimum non-dégénéré (dans un sens naturel) pour la longueur des courbes $C^1$ reliant $U_j$ à $U_k$, alors

$$\hat{W}_{j,k}(\lambda) = a_{j,k}(\lambda)\,e^{-\lambda d(U_j,U_k)} \tag{2.5}$$

$$a_{j,k}(\lambda)\sim\lambda^{m_j+m_k-(n+1)/2}\sum_{\nu\in\frac{1}{2}\mathbb{N}} a^{\nu}_{j,k}\,\lambda^{-\nu} \tag{2.6}$$

Ce résultat qui peut encore être précisé dans le cas réel-analytique a été démontré dans [3].

Si $E_o$ est la valeur propre principale pour chaque oscillateur harmonique, alors la somme dans (2.6) porte sur $\mathbb{N}$ et $a^0_{j,k} < 0$.

Dans tous les exemples dans cet exposé, on se place tacitement dans des situations où la remarque précédente s'applique.

Exemple 2.5 : Deux puits : La matrice A du Théorème 2.2 devient alors

$$A = \begin{pmatrix} \mu_1 & \alpha \\ \alpha & \mu_2 \end{pmatrix} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h}) \quad ,$$

où $\alpha = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(S_o-\varepsilon)/h}), \forall\, \varepsilon > 0$ , admet un développement asymptotique.
Dans le cas où $\mu_j$ est la première valeur propre pour chaque puits (ou dans la cas $n = 1$), on sait que $\alpha$ est du même ordre de grandeur que $e^{-S_o/h}$ à une puissance de h près, et on trouve pour $P/_F$ les deux valeurs propres :

$$\lambda_\pm = \frac{\mu_1 + \mu_2}{2} \pm \sqrt{\alpha^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2/4} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h}) \ .$$

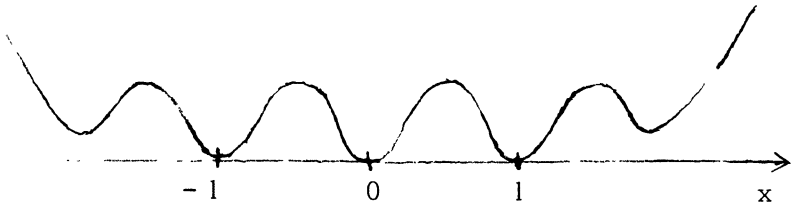
En particulier,

$$\lambda_+ - \lambda_- = \sqrt{4\alpha^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h}) \ . \tag{2.7}$$

ce qui permet de préciser un résultat de B. Simon [10].

Si on a une symétrie convenable, alors $\mu_1 = \mu_2$ et (2.7) donne un développement asymptotique pour $\lambda_+ - \lambda_-$ , qui dans des situations "très symétriques" a été obtenu par Harrel [2].

Exemple 2.6 : Si $M = \mathbb{R}^n$ notre théorie s'applique si $\lim_{|x|\to\infty} V(x) > 0$. On se place sur $\mathbb{R}$ avec un potentiel comme dans la figure :



On suppose que $V(x) = V(-x)$ pour tout $x \in \mathbb{R}$, $V(-\frac{1}{2}-y) = V(-\frac{1}{2}+y)$ si $|y| < \frac{1}{2}+\delta$, où $\delta \in ]0,1[$ est proche de 1. Si l'on choisit convenablement les intervalles $M_{-1}, M_o, M_1$, associés aux puits $-1, 0, 1$, alors $\mu_{-1} = \mu_1 \underset{\text{def}}{=} \mu$, et on peut montrer que

$$\mu_{-1} - \mu_o = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(2d(0,\delta)-\varepsilon)/h}) << e^{-S_o/h} .$$

La matrice de $P_{/F}$ devient

$$\mu I + \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & \alpha \\ 0 & \alpha & 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(2d(0,\delta)-\varepsilon)/h}) \quad (, \forall\ \varepsilon > 0) ,$$

où $\alpha$ a les mêmes propriétés que dans l'exemple précédent. On trouve les valeurs propres $\mu$, $\mu \pm \sqrt{2}\,\alpha$, modulo $\mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(2d(0,\delta)-\varepsilon)/h})$.

<u>Exemple 2.7</u> : N puits sur $S^1$ avec V invariant par la rotation d'angle $2\pi/N$. On trouve la matrice

$$\mu I + \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \alpha \\ \alpha & 0 & \alpha & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & \alpha & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \alpha & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & & & & \alpha & 0 & \alpha \\ \alpha & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \alpha & 0 \end{pmatrix} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h}) ,$$

d'où les valeurs propres $\lambda_j = \mu + 2\alpha \cos \frac{2\pi j}{N} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h})$.

## 3. INTERACTION ET SYMETRIES

Soit $G$ un groupe fini d'isométries de $M$ qui conservent $V$ : $V \circ g = V$, $g \in G$. Si $g \in G$, $u \in L^2(M)$ on pose $g(u) = u \circ g^{-1}$. $G$ agit donc unitairement sur $L^2(M)$ et l'action de $G$ commute avec $P$. Si $U_j$ est un des puits et $g \in G$ alors $g(U_j) = U_{\sigma_g(j)}$. $G$ agit donc comme un groupe de permutations sur $\{1,\dots,N\}$. On suppose que cette action est transitive. On peut facilement s'arranger pour que $g(M_j) = M_{\sigma_g(j)}$, $g(\chi_j) = \chi_{\sigma_g(j)}$. Il est alors clair que $S_p(P_{M_j})$ ne dépend pas de $j$. $G$ agit de manière naturelle sur $\bigoplus_1^N L^2(M_j)$ et sur $\bigoplus_1^N E_j$ si $E_j$ est l'espace engendré par $\varphi_{j,1},\dots,\varphi_{j,m}$, $m = m_j$.
Soit $M^\psi(g)$ la matrice de $g : \bigoplus_1^N E_j \to \bigoplus_1^N E_j$ pour la base orthonormée des $\varphi_\alpha$.
On vérifie alors que $M^\psi(g)$ est aussi la matrice de $g : F \to F$ pour la base $\vec{e}$ introduite dans le Théorème 2.2 et que chacun des 3 termes de (2.3), commute avec $M^\psi(g)$. On peut alors décomposer :

$$\mathbb{C} \otimes F = \bigoplus_{\rho \in \hat{G}} F_\rho \tag{3.1}$$

où $\hat{G}$ est l'ensemble des représentations irréductibles de $G$ et $F_\rho$ est isomorphe à un nombre fini $(m_\rho)$ de copies de $\rho$. Chaque $F_\rho$ est stable pour $P$ et donne lieu à $m_\rho$ valeurs propres (pas nécessairement distinctes) de multiplicité $d^o\rho$, où $d^o\rho$ est le degré de $\rho$. Si $\bar{\rho} \neq \rho$ on a $F_{\bar{\rho}} = \bar{F}_\rho$ et $F_\rho \oplus F_{\bar{\rho}}$ donne lieu à $m_\rho$ valeurs propres de multiplicité $2d^o\rho$. (Voir Serre [8]).

## 4. INTERACTION MOLECULAIRE

On suppose que les puits, que l'on note maintenant $U_{j,k}$, sont regroupés en $q$ molécules :

$$M_j = \bigcup_{k=1}^{N_j} U_{j,k} \quad , \quad N = \sum_1^q N_j .$$

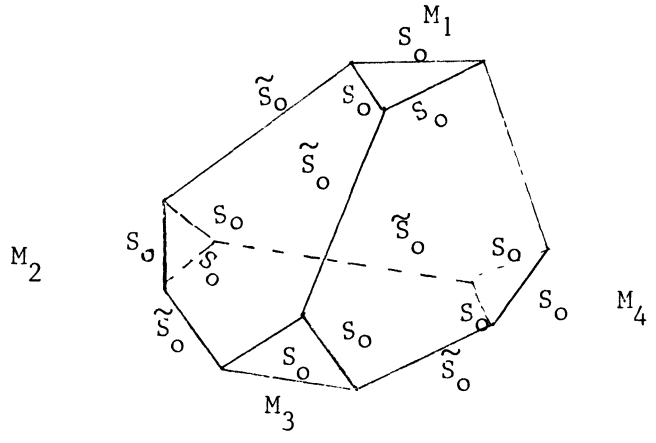
Soit $S_o = \min_{(j,k) \neq (j',k')} d(U_{j,k}, U_{j',k'})$, $\tilde{S}_o = \min_{j \neq j'} d(U_{j,k}, U_{j',k'})$.

Alors $S_o \leqslant \tilde{S}_o$ et le regroupement devient intéressant si $S_o < \tilde{S}_o$. Les matrices dans (2.3) se décomposent en blocs :

$A = (A_{j,k})_{1 \leqslant j,k \leqslant q}$ , $C \underset{\text{def}}{=} (C_{j,k}) = \mathrm{diag}(\mu_\alpha) + \hat{W}$ , $R = (R_{j,k})$ , suivant la décomposition en molécules. D'après le théorème 2.2 on a $R_{j,k} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h})$ si $j = k$, $R_{j,k} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_o + \tilde{S}_o)/h}$ si $j \neq k$ .

On peut ici diagonaliser d'abord chaque bloc diagonal $A_{j,j}$ et ensuite corriger le résultat en tenant compte des blocs extradiagonaux. La première étape correspond à résoudre le problème spectral pour chaque molécule, et la deuxième étape consiste à étudier les corrections intermoléculaires. La deuxième étape peut paraître suspecte au moins si $\tilde{S}_o \geqslant 2 S_o$ , car même si l'on arrive à connaître parfaitement les matrices $C_{j,j}$ on ne connaîtra les valeurs propres de $A_{j,j}$ que modulo $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h})$. Cette incertitude peut être plus grande que les corrections de la deuxième étape qui sont $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{S}_o/h})$ . Néanmoins, cette démarche apporte des résultats significatifs si on a assez de symétries. Plutôt que d'énoncer un théorème général (que l'on trouvera dans [4]), nous considérons l'exemple suivant :

<u>Exemple 4.1</u> On considère 12 puits dans $\mathbb{R}^3$ ou dans une variété de dimension au moins 2, distribués comme sur la fig. :




Ici les puits sont situés dans les sommets et les arêtes (qui ne sont pas nécessairement des droites, même dans le cas $M = \mathbb{R}^3$) indiquent des géodésiques minimales de longueur $S_o$ et $\tilde{S}_o$ respectivement. Soit $\tilde{\tilde{S}}_o$ la séparation minimale entre puits qui ne sont pas sur la même arête. On suppose $S_o < \tilde{S}_o < \tilde{\tilde{S}}_o$ .

On suppose aussi que $V$ soit invariant par un groupe fini d'isométries $G$

qui pour chaque molécule (p.ex. $M_1$) contient un élément qui permute circulairement les puits de cette molécule (et qui échange obligatoirement les trois autres molécules de manière circulaire). Enumérant convenablement les 12 puits, on trouve que la matrice de $P|_F$ est de la forme

$$\mu I + \begin{pmatrix} \delta & \alpha & R\alpha R^{-1} & R^2\alpha R^{-2} \\ \alpha & \delta & R^2\alpha R^{-2} & R\alpha R^{-1} \\ R\alpha R^{-1} & R^2\alpha R^{-2} & \delta & \alpha \\ R^2\alpha R^{-2} & R\alpha R^{-1} & \alpha & \delta \end{pmatrix},$$

où

$$\delta = \begin{pmatrix} 0 & a & a \\ a & 0 & a \\ a & a & 0 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} + \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(\tilde{\tilde{S}}_o-\varepsilon)/h}).$$

Ici $a = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(S_o-\varepsilon)/h})$, $b = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(\tilde{S}_o-\varepsilon)/h})$ ont des développements asymptotiques. Si $\mu$ est la plus petite valeur propre, alors à une puissance de $h$ près, $a$ et $b$ sont de même ordre de grandeur que $e^{-S_o/h}$ et $e^{-\tilde{S}_o/h}$ respectivement. On trouve les valeurs propres

$$\lambda_1 = \mu + 2a + b + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{S}}_o/h}) \qquad \text{de multiplicité } 1$$

$$\lambda_2 = \mu + 2a - b/3 + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\min(\tilde{\tilde{S}}_o, 2\tilde{S}_o - S_o)/h}) \qquad \text{- " -} \quad 3$$

$$\lambda_3 = \mu - a + b + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{S}}_o/h}) \qquad \text{- " -} \quad 2$$

$$\lambda_4 = \mu - a - b + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\min(\tilde{\tilde{S}}_o, 2\tilde{S}_o - S_o)/h}) \qquad \text{- " -} \quad 3$$

$$\lambda_5 = \mu - a + \frac{b}{3} + \tilde{\mathcal{O}}(\quad \text{- " -} \quad) \qquad \text{- " -} \quad 3$$

Nous remercions A. Grigis pour des conversations très utiles sur cet exemple.

## 5. PERTURBATIONS

On s'est ici inspiré d'un travail de Jona-Lasinio, Martinelli, Scoppola [6], dont on peut retrouver et préciser les résultats (voir [4]). Nous traiterons ici deux exemples un peu différents.

Dans la situation générale du Théorème 2.2 on s'intéresse à l'effet sur le spectre de $P$, quand on remplace $V$ par $V + t\Delta V$, où $t \in \mathbb{R}$, $\Delta V \in C^\infty(M ; \mathbb{R})$. Quitte à augmenter $I(h)$ très légèrement, les hypothèses du Théorème 2.2 restent vérifiées de manière uniforme dans deux cas :

1°) $|t| \leqslant e^{-\varepsilon_o/h}$ pour un $\varepsilon_o > 0$,

2°) $\Delta V \geqslant 0$ est à support disjoint des $U_j$ et $t \in [0,1]$.

Pour chaque $M_j$ on a d'abord un résultat de perturbation, que l'on énonce ici seulement dans le cas $m_j = 1$.

<u>Théorème 5.1 ([4])</u> : <u>On se place dans le cas 1° ou 2° et on suppose que</u> $m_j = 1$. <u>Soit</u> $P_t = P + t\Delta V$ <u>et</u> $P_{t,M_j}$ <u>la réalisation de Dirichlet dans</u> $L^2(M_j)$. <u>Alors</u> (<u>après avoir légèrement augmenté</u> $I(h)$), $P_{t,M_j}$ <u>admet une seule valeur propre</u> $\mu_j^t \in I(h)$ <u>et si</u> $\varphi_j^t \in L^2(M_j)$ <u>est la fonction propre correspondante, normalisée de façon à dépendre continûment de</u> $t$, <u>alors pour tout</u> $\varepsilon > 0$,

$$\varphi_j^t - \varphi_j^0 = t\,\mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(\delta(x)-\varepsilon)/h} + e^{-(2L+d(x,U_j)-\varepsilon)/h}),$$

où $\delta(x) = \inf_{y \in \operatorname{supp}\Delta V} d(U_j,y) + d(y,x)$, $L = d(U_j, \operatorname{supp}\Delta V)$. De plus

$$\mu_j^t = \mu_j^0 + t(\Delta V\,\varphi_j^0 \,|\, \varphi_j^0) + t^2\,\mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(2L-\varepsilon)/h}).$$

On peut aussi donner un théorème général sur $P_t$ comme opérateur sur $M$, mais on passera ici directement à deux exemples :

Exemple 5.2 : Soit $V$ comme dans l'exemple 2.6 et $0 \leqslant \Delta V \in C^{\infty}(]-\varepsilon_1,\varepsilon_1[)$ symétrique avec $V(0) > 0$, et $|t| \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}$. Soient $\mu_0^t$, $\mu_{-1}^t = \mu_1^t$ les valeurs propres de $P_t$ asoociées aux $0,-1,1$ et rappelons que $\mu_0^0 - \mu_1^0 = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(2d(0,\delta)-\varepsilon)/h})$. Appliquant le Théorème 5.1 pour chaque puits on trouve que $\mu^t$ varie sensiblement avec $t$ pendant que $\mu_{\pm 1}^t$ restent pra quement inchangés : $\mu_0^t - \mu_0^0 = C_0 t + \mathcal{O}_\varepsilon(e^{\varepsilon t})\, t^2$, $C > 0$, $\mu_{\pm 1}^t - \mu_{\pm 1}^0 = t\, \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(2d(\varepsilon_1,1)-\varepsilon)h})$

La matrice de $P_t|F_t$ prend la forme

$$\mu_1^t I + \alpha_t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & s & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) . \tag{5.1}$$

Ici $\alpha_t = (1 + \mathcal{O}(h^{\infty}))\alpha_0$ est du même ordre de grandeur que $e^{-S_0/h}$ à une puissance de $h$ près, et

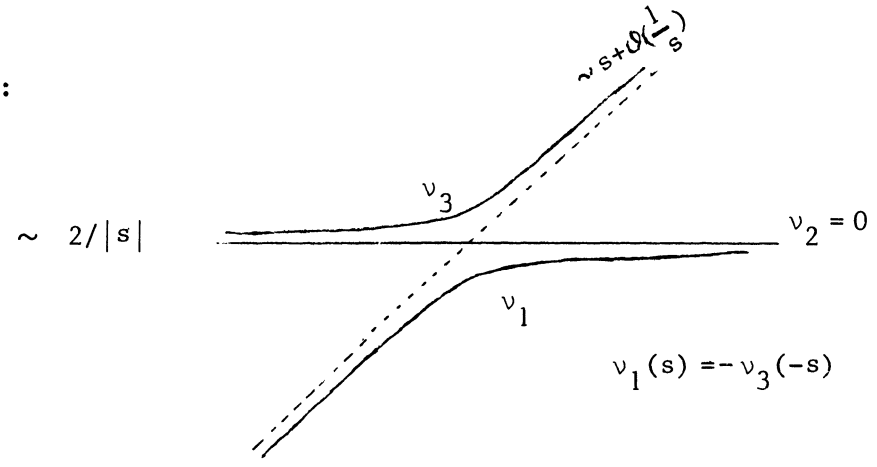
$$\alpha_t s = \mu_0^t - \mu_1^t = \mu_1^0 - \mu_1 + C_0 t + \mathcal{O}_\varepsilon(e^{\varepsilon/h})(t^2 + t\, e^{-2d(\varepsilon_1,1)/h}) .$$

Donc varie grosso modo entre $\pm \exp(S_0 - \varepsilon_0)/h$.

Les valeurs propres de la matrice du second terme du (5.1) sont

$$\nu_1 = \frac{s}{2} - \sqrt{2 + s^2/4} \quad , \quad \nu_2 = 0 \quad , \quad \nu_3 = \frac{s}{2} + \sqrt{2 + s^2/4} \quad :$$

fig. :



Les valeurs propres de $P_t|_{F_t}$ sont $\lambda_j^t = \mu_1^t + \alpha_t \nu_j + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_o/h})$ . Les écarts entre les $\alpha_t \nu_j$ dominent sur le reste et la figure décrit aussi assez bien le comportement de $\lambda_1$ , $\lambda_2$ , $\lambda_3$. On observe que $(\lambda_3^t - \lambda_2^t)(\lambda_2^t - \lambda_1^t) = 4\alpha_o^2(1 + \mathcal{O}(h^\infty))$. Quand $|s| >> 1$, la fonction propre correspondant à $\lambda_1$ pour $s < 0$ et $\lambda_3$ pour $s < 0$ est concentrée dans le puits au milieu, pendant que $\lambda_2$ et $\lambda_3$ pour $s < 0$ et $\lambda_1$ et $\lambda_2$ pour $s > 0$ décrivent un phénomène de double puits entre les puits extérieurs, où sont concentrées les fonctions propres correspondantes.

<u>Exemple 5.3</u> : On considère 4 puits sur $S^1$ distribués de manière symétrique par rotation de $\pi/2$ : $U_j = j\pi/2 - \pi/4$ , $j = 1,2,3,4$ , comme dans l'exemple 2.7. Pour $t = 1$ on considère une perturbation $\Delta V \geqslant 0$ avec $\Delta V(x+\pi) = \Delta V(x)$ , $\operatorname{supp} \Delta V \subset ]U_2, U_3[ \cup ]U_4, U_1[$ et avec $d(U_2, \operatorname{supp} \Delta V) < S_o/2 < d(U_3, \operatorname{supp} \Delta V)$. Soit $W = V + \Delta V$. Si $\mu_j = \mu_j^1$ est la valeur propre associée à $P = P^1 = -h^2 \Delta + W$ et au puits $U_j$ , on montre à l'aide du Théorème 5.1, que pour tout $\varepsilon > 0$ on a

$$\frac{1}{C_\varepsilon} e^{-(2L+\varepsilon)/h} \leqslant \mu_2 - \mu_1 \leqslant C_\varepsilon e^{-(2L-\varepsilon)/h} ,$$

où $L = d(U_2, \operatorname{supp} \Delta V)$. (Pour abréger on écrira simplement $\mu_2 - \mu_1 \approx e^{-2L/h}$ dans la suite). Aussi par symétrie $\mu_3 = \mu_1$ , $\mu_4 = \mu_2$ . La métrique d'Agmon se trouve modifiée, et on pose $S_o = d_V(U_1, U_2)$ , $\tilde{S}_o = d_W(U_2, U_3)$ où donc $\tilde{S}_o > S_o$ . Il est naturel de décomposer en molécules $M_1 = U_1 \cup U_2$, $M_2 = U_3 \cup U_4$. Analysant la matrice de $P|_{F_t}$ on trouve que les 4 valeurs propres $\lambda_1, \ldots, \lambda_4$ proches de $\mu_1, \ldots, \mu_4$ , vérifient :

$$\left.\begin{array}{l} \lambda_1 \equiv \lambda_2 \equiv \mu_1 \\ \lambda_3 \equiv \lambda_4 \equiv \mu_2 \end{array}\right\} \bmod \mathcal{O}_\varepsilon(e^{-(2S_o - 2L - \varepsilon)/h}) .$$

Les corrections intermoléculaires donnent

$$\lambda_2 - \lambda_1 \quad , \quad \lambda_4 - \lambda_3 \approx e^{-(S_o + \tilde{S}_o - 2L)/h} .$$

De nouveau, on assiste à des phénomènes de double puits : $\lambda_1$ et $\lambda_2$ correspondent à une interaction de $U_1$ et $U_3$ à travers des puits "faiblement resonnants" $U_2$ et $U_4$.

De même $\lambda_3$ et $\lambda_4$ correspondent à une interaction de $U_2$ et $U_4$ à travers de $U_2$ et $U_3$.

## 6. INTERACTION A TRAVERS DES PUITS NON-RESONNANTS

On résume ici très brièvement le résultat principal de [5]. On reprend toutes les hypothèses de la Remarque 2.4, mais avec une modification : Au lieu de supposer que pour tout $j$, $P_{M_j}$ admette une seule valeur propre de la forme $\mu_j \sim h\,E(h)$, on suppose que ça soit le cas seulement pour $1 \leqslant j \leqslant \overline{N}$, où $1 \leqslant \overline{N} < N$ et que $E_o$ ne soit même pas une valeur propre pour l'oscillateur harmonique en $U_j$ pour $j \geqslant \overline{N}+1$. On appelle alors $U_j$ "puits résonnant" si $j \leqslant \overline{N}$ et "puits non résonnant" si $j \geqslant \overline{N}+1$. Soit $\overline{S}_o = \min\limits_{j \neq k, j,k \leqslant \overline{N}} d(U_j U_k)$. Si par exemple $\overline{S}_o \geqslant 2\,S_o$, alors le Théorème 2.2 risque d'être assez vide en ce qui concerne le phénomène d'interaction.

On modifie les problèmes de référence en introduisant $\overline{M}_j = M \setminus \bigcup\limits_{j \neq k \leqslant \overline{N}} B(U_k, \eta)$ pour $j \leqslant \overline{N}$. Alors on montre facilement que $P_{\overline{M}_j}$ admet une seule valeur propre $\overline{\mu}_j \in I(h)$ et que $\overline{\mu}_j - \mu_j$ est exponentiellement petit. Soit $\overline{\varphi}_j \in L^2(\overline{M}_j)$ la fonction propre normalisée associée à $\overline{\mu}_j$ et posons $\overline{\psi}_j = \overline{\chi}_j\,\overline{\varphi}_j$ où $\chi_j = 1 - \sum\limits_{j \neq k \leqslant \overline{N}} \theta_k$. Si $\overline{\mathcal{D}}'$ est la matrice $\overline{N} \times \overline{N}$ donnée par $\left((1-\delta_{j,k})e^{-d(U_j,U_k)/h}\right)$ alors on a un théorème abstrait parfaitement analogue au Théorème 2.2, décrivant la matrice de $P_{/F}$ dans la base orthonormalisée de $\pi_F(\overline{\psi}_i)$ par $\mathrm{diag}\,(\overline{\mu}_j) + \hat{\overline{W}} + \overline{R}$, où $\overline{R} = \tilde{\mathcal{O}}\,(\overline{\mathcal{D}}'^2 + \overline{\mathcal{D}}'^3)$, $\hat{\overline{W}} = (\hat{\overline{w}}_{j,k})$, $\hat{\overline{w}}_{j,k} = \frac{1}{2}(\overline{w}_{j,k} + \overline{w}_{k,j})$, $\overline{w}_{j,k} = h^2 \int \overline{\chi}_j (\overline{\varphi}_k \nabla \overline{\varphi}_j - \overline{\varphi}_j \nabla \overline{\varphi}_k)\, \nabla \chi_k \, dx$.

Fixons $j_0, k_0 \leqslant \overline{N}$ avec $j_0 \neq k_0$. On suppose que $U_{j_0}$ et $U_{k_0}$ sont reliés par une géodésique minimale unique $\gamma$. (On peut aussi traiter le cas d'un nombre fini de telles géodésiques). En général $\gamma$ passe alors par d'autres puits comme indiqué sur la fig :

On suppose que les $U_{j_k}$ , $k = 1,\dots,M-1$ sont non-résonnants, (sinon on aurait $d(U_{j_o},U_{k_o}) = \mathcal{O}((\overline{\mathcal{D}}'^{\,2})_{j_o,k_o})$ et que chacun des segments $\gamma_k$ réalise un minimum non-dégénéré pour la longueur des courbes $C^1$ de $U_{j_{k-1}}$ à $U_{j_k}$ .
On fait aussi une hypothèse(que l'on ne détaillera pas ici, mais qui semble être génériquement satisfaite), sur la position des tangents de $\gamma_{j_k}$ et $\gamma_{j_{k+1}}$ en $U_{j_k}$ , pour $k = 1,\dots,M-1$. Alors on peut montrer que

$$\hat{\overline{w}}_{j_o,k_o} = b(\lambda)e^{-\lambda d(U_{j_o},U_{k_o})} \quad (\lambda = 1/h) \text{ , où } b(\lambda)\sim\lambda^m \sum_0^\infty c_\nu(\log\lambda)\,\lambda^{-p_\nu} .$$

Ici $c_\nu$ sont des polynômes, $c_o$ est une constante que l'on peut déterminer. De plus,

$$m = m_{j_o} + m_{k_o} - (n+1)/2 - \sum_{k=1}^{M-1}\left(\left(\frac{1}{2}\left(\sum_1^n \lambda_\nu^{(j_k)}\right) - E_o\right)/\lambda_1^{(j_k)} - \frac{1}{2}\right) ,$$

et $0 = p_o < p_1 < \dots$ sont les combinaisons linéaires sur $\mathbb{N}$ des nombres $\lambda_\nu^{(j_k)}/\lambda_1^{(j_k)}$ , $(\lambda_\nu^{(j_k)} - \lambda_1^{(j_k)})/\lambda_1^{(j_k)}$ (pour $k = 1,\dots,M-1$) , $1/2$ .

La démonstration est longue et assez technique, mais contient de la géométrie intéressante. Dans le cadre analytique des problèmes assez proches ont été évoqués par F. Pham [7].

* * *

BIBLIOGRAPHIE


[1] S. AGMON : Lectures on exponential decay of solutions to second order elliptic equations, Math. Notes, Princeton University Press n° 29 (1982).

[2] E.M. HARRELL : Double Wells, Comm. Math. Phys. 75(1980), 239-261.

[3] B. HELFFER , J. SJÖSTRAND : Multiple wells in the semi-classical limit I, preprint.

[4] B. HELFFER , J. SJÖSTRAND : Puits multiples en limite semi-classique II, manuscrit.

[5] B. HELFFER , J. SJÖSTRAND, Multiple wells in the semi-classical limit III, manuscrit.

[6] G. JONA-LASINIO, F. MARTINELLI, F. SCOPPOLA : New approach to the semi-classical limit of quantum mechanics, I. Tunnelings in one dimension, Comm. Math. Phys. 80(1981), 223-254.

[7] F. PHAM : Calcul microdifferentiel complexe et méthode semi-classique. Prépublic. de Math. de l'Univ. de Nice n° 14 (1983).

[8] J-P. SERRE : Représentations linéaires de groupes finis, Hermann, Paris (1967).

[9] B. SIMON : Semi-classical analysis of low lying eigenvalues I. Non-degenerate minima : Asymptotic expansions. Ann. Inst. Henri Poincaré, 38 n° 3 (1983), 295-307. (et correction à paraître).

[10] B. SIMON : Semi-classical analysis of low lying eigenvalues II. Tunneling. Preprint. Voir aussi : Instantons, double wells and large derivations, Bull. A.M.S. Vol. 8, n° 9 , March 1983, 323-326.

*
* *
*