André Martinez

Estimations sur l'effet tunnel microlocal

Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1991-1992), exp. n° 8, p. 1-10

<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1991-1992____A8_0>

CENTRE
DE
MATHEMATIQUES

Unité de Recherche Associée D 0169

ECOLE POLYTECHNIQUE

F-91128 PALAISEAU Cedex (FRANCE)
Tél. (1) 69 33 40 91
Fax (1) 69 33 30 19 ; Télex 601.596 F

Séminaire 1991-1992

EQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES

ESTIMATIONS SUR L'EFFET TUNNEL MICROLOCAL

André MARTINEZ

Exposé n° VIII

21 Janvier 1992

1. Introduction.

Pour étudier le spectre d'une molécule, les chimistes ont généralement recours à l'approximation de Born-Oppenheimer, qui ramène essentiellement cette étude à celle d'un système semi-classique, dans lequel interviennent un certain nombre de potentiels appelés niveaux électroniques. Lorsque ces niveaux ne se croisent pas, la partie principale de ce système peut être diagonalisée, et le système s'écrit alors sous la forme :

$$P = \text{diag}\,(-h^2\Delta + V_j(x))_{1\leq j\leq N} + hR(x, hD_x) \tag{1.1}$$

où R est une matrice symétrique d'opérateurs pseudo-différentiels de degré ≤ 2, et $h > 0$ est petit (cf. [KMSW]). Dans une telle situation, les niveaux électroniques $V_j(x)$ n'interagissent que très faiblement, et l'on peut montrer dans certains cas que l'effet tunnel entre eux est exponentiellement petit lorsque $h \to 0+$ (cf. [Ma 2], [Me]). Néanmoins, on n'avait jusqu'à présent aucun moyen de préciser de manière convaincante le taux de cette décroissance exponentielle.

La motivation première de cet exposé est précisément de proposer une méthode pour étudier de manière un peu plus fine une telle interaction. Un exemple typique est donné par le système 2×2 sur $L^2(\mathbf{R}^n) \oplus L^2(\mathbf{R}^n)$:

$$P_0 = \begin{pmatrix} -h^2\Delta - x_n - 1 & 0 \\ 0 & -h^2\Delta + x^2 \end{pmatrix} + hR(x, hD_x) \tag{1.2}$$

que l'on étudie près du niveau d'énergie 0. Les puits associés aux deux potentiels sont respectivement $\mathcal{U}_1 = \{x_n \geq -1\}$ et $\mathcal{U}_2 = \{0\}$, si bien que $\mathcal{U}_2 \subset \mathcal{U}_1$ et l'interaction ne pourra que difficilement se mesurer dans l'espace des x. Considérant alors plutôt les puits microlocaux $W_1 = \{\xi^2 - x_n - 1 = 0\}$ et $W_2 = \{\xi^2 + x^2 = 0\}$, on observe que ceux-ci sont disjoints dans $T^*\mathbf{R}^n$, et l'on peut alors espérer estimer leur interaction (qui s'exprime ici par la partie imaginaire des résonances proches de 0) à l'aide d'une sorte de distance entre W_1 et W_2, pour peu que l'on se place dès le départ dans un contexte microlocal (qui doit également, vu la nature du problème, être analytique).

C'est pourquoi nous utilisons ici la théorie des résonances de Helffer et Sjöstrand [He Sj] dont le fondement réside dans l'emploi d'une transformation de F.B.I. d'un type un peu particulier, et qu'il nous faudra préciser encore d'avantage ici. Le résultat principal que nous obtenons consiste alors en une estimation globale à poids exponentiel sur l'image par une telle transformation d'un opérateur différentiel à coefficients holomorphes dans un domaine complexe assez grand. De plus, pour simplifier l'exposé, on ne décrit ici le résultat que dans le cas d'opérateurs à coefficients bornés, et on renvoie à [Ma 3] pour le cas plus général d'une croissance polynomiale.

2. Transformation de F.B.I.

Afin de contrôler avec précision les termes d'erreur exponentiellement petits qui apparaîtront, on adjoint à la définition de [He Sj] §4 un paramètre supplémentaire $\lambda \geq 1$, qu'il faudra fixer suffisamment grand dans les applications.

Pour $u \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$, et $\alpha = (\alpha_x, \alpha_\xi) \in \mathbf{C}^{2n}$, on pose

$$\mathbf{T}u(\alpha; h) = \int e^{i(\alpha_x - y)\alpha_\xi/h - \mu_\lambda(\alpha)(\alpha_x - y)^2/h} \vec{t_\lambda}(\alpha, y) \chi_\lambda(\alpha, y) u(y) dy \tag{2.1}$$

où l'on a noté :

$$\begin{aligned}
\chi_\lambda(\alpha, y) &= \chi_1 \left(\frac{\text{Re } \alpha_x - y}{\lambda + \langle \text{Re } \alpha_x \rangle} \right) \\
\mu_\lambda(\alpha) &= \mu_0 \chi_2 \left(\frac{\langle \text{Re } \alpha \rangle}{\lambda} \right) + \mu_1 \frac{\langle \text{Re } \alpha_\xi \rangle}{\langle \text{Re } \alpha_x \rangle} \left(\Lambda - \chi_2 \left(\frac{\langle \text{Re } \alpha \rangle}{\lambda} \right) \right) \\
\vec{t_\lambda}(\alpha, y) &= \left(1, \frac{y - \alpha_x}{R_\lambda(\alpha_x)} \right) \\
R_\lambda(\alpha_x) &= 1 + \left(1 - \chi_3 \left(\frac{\text{Re } \alpha_x}{\lambda} \right) \right) \langle \text{Re } \alpha_x \rangle
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
&\chi_1 \in C_0^\infty(B(0, \tfrac{1}{2}); [0,1]), \chi_1 = 1 \quad \text{dans} \quad B(0, \tfrac{1}{4}) \\
&\chi_2 \in C_0^\infty(B(0, 8); [0,1]), \chi_2 = 1 \quad \text{dans} \quad B(0,4), \{\chi_2 \geq \tfrac{1}{2}\} = B(0,6) \\
&\chi_3 \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n; [0,1]), \chi_3 = 1 \quad \text{dans} \quad B(0,4)
\end{aligned}$$

μ_0 et $\mu_1 > 0$.

Si maintenant $G \in C^\infty(\mathbf{R}^{2n})$ vérifie pour tout $\beta, \gamma \in \mathbf{N}^n$.

$$\partial_x^\beta \partial_\xi^\gamma G(x, \xi) = \mathcal{O}(\langle x \rangle^{1-|\beta|} \langle \xi \rangle^{1-|\gamma|})$$

$$|\xi| = \mathcal{O}(1) \quad \text{sur} \quad \text{Supp } G$$

alors (cf [He Sj])

$$\mathbf{T}(C_0^\infty(\mathbf{R}^n)) \subset L^2_{tG} \stackrel{\text{def}}{=} L^2(\Lambda_{tG}, e^{-2tH(\alpha)/h} d\alpha) \tag{2.2}$$

où

$$\begin{aligned}
\Lambda_{tG} &= \{\alpha \in \mathbf{C}^{2n}; \text{Im } \alpha_x = t\partial_\xi G(\text{Re } \alpha), \text{Im } \alpha_\xi = -t\partial_x G(\text{Re } \alpha)\} \\
H(\alpha) &= G(\text{Re } \alpha) - \text{Re } \alpha_\xi \partial_\xi G(\text{Re } \alpha).
\end{aligned}$$

3. Estimations à poids exponentiel.

Les poids exponentiels que nous utilisons ici sont du type $e^{\psi/h}$ où $\psi = \psi(\text{Re }\alpha) \in C^\infty(\mathbf{R}^{2n}; \mathbf{R})$ vérifie :

$$\text{Supp }\nabla\psi \subset \{\langle \text{Re }\alpha\rangle \leq \frac{\lambda}{3}\} \ . \tag{3.1}$$

(En particulier, ψ est constante sur Supp $\nabla\mu$)

Pour un tel poids, on considère l'espace $\mathcal{L}^d_\psi$ des opérateurs différentiels $P = \sum_{|\gamma|\leq d} a_\gamma(x)(hD_x)^\gamma$ dont les coefficients a_γ se prolongent en des fonctions holomorphes (que l'on supposera également bornées ici) dans un domaine du type

$$D_{\lambda,\psi,\delta} = \{z \in \mathbf{C}^n; |\text{Im}z| \leq \max\{\sup|\partial_\xi\psi| + \delta; \frac{\lambda}{\mu_1} + \frac{12\lambda}{\mu_0} + \frac{6}{\mu_1}\langle \text{Re }z\rangle\}\}$$

avec $\delta > 0$.

On définit aussi

$$S_\lambda = \min\left\{\frac{\mu_0\lambda^2}{64}; \frac{n\mu_0\lambda^2}{128}; \frac{\mu_1\lambda}{128}; \frac{n\mu_1\lambda}{16^2}; \frac{\lambda}{16(\mu_0+\mu_1)}\right\}$$

et on suppose qu'il existe $\delta_0 > 0$ tel que :

$$S_\lambda \geq \delta_0 + 2\sup\psi \tag{3.2}$$

(Remarquons qu'à ψ, μ_0 et μ_1 fixés, (3.2) sera automatiquement satisfaite en prenant λ assez grand)

Notre principal résultat est alors (en notant H^s_δ l'espace de Sobolev à poids :

$$H^s_\delta = H^s(\mathbf{R}^n, e^{-\delta\langle x\rangle/h}dx)) \ .$$

Théorème.— *Soit ψ comme ci-dessus vérifiant (3.1) et (3.2). Alors, pour tout $P \in \mathcal{L}^d_\psi$, il existe $\delta > 0$ tel que pour tout $t \in \mathbf{R}$ assez petit, tout $s \in \mathbf{R}$, et tout $u, v \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$:*

$$\begin{aligned}
&\langle e^{\psi/h}\mathbf{T}Pu \ , \ e^{\psi/h}\mathbf{T}v\rangle_{L^2_{tG}} \\
&= \langle p(\alpha_x - \partial_{\mu,t}\psi(\alpha), \alpha_\xi + 2i\mu\partial_{\mu,t}\psi(\alpha))e^{\psi/h}\mathbf{T}u \ , \ e^{\psi/h}\mathbf{T}v\rangle_{L^2_{tG}} \\
&+\mathcal{O}(h[\|\langle\alpha_\xi\rangle^{d-1}e^{\psi/h}\mathbf{T}u\|_{L^2_{tG}} + \|u\|_{H^s_\delta}] \\
&\times[\|e^{\psi/h}\mathbf{T}v\|_{L^2_{tG}} + \|v\|_{H^s_\delta}])
\end{aligned}$$

uniformément pour $u, v \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$, et $h > 0$ assez petit.

Ici $p(\alpha_x, \alpha_\xi) = \sum_{|\gamma|\leq d} a_j(\alpha_x)\alpha_\xi^\gamma$

$$\partial_{\mu,t} = \left(\frac{1}{2\mu} + F_t(\alpha)\right)\frac{\partial}{\partial\alpha_x} + i(1+\tilde{F}_t(\alpha))\frac{\partial}{\partial\alpha\xi}$$

où $F_t(\alpha), \tilde{F}_t(\alpha)$ *sont des matrices* $n \times n$ *s'expriment à l'aide de* G *et* μ *uniquement, supportées par Supp(Hess* G*), et vérifiant :*

$$|\partial^\gamma F_t| + |\partial^\gamma \tilde{F}_t| = \mathcal{O}(|t|)$$

Remarque 1 : On peut en fait insérer un poids polynomial dans cette estimation, et obtenir comme corollaire :

$$\|e^{\psi/h}\mathbf{T}Pu\|^2_{L^2_{tG}} = \|p(\alpha_x - \partial_{\mu,t}\psi, \alpha_\xi + 2i\mu_0\partial_{\mu,t}\psi)e^{\psi/h}\mathbf{T}u\|^2$$
$$+h\mathcal{O}(\|\langle\alpha_\xi\rangle^{d-1/2}e^{\psi/h}\mathbf{T}u\|^2 + \|u\|^2_{H^s_\delta})\ . \tag{3.3}$$

Remarque 2 : Il faut noter qu'un résultat analogue à celui du théorème est relativement facile à démontrer lorsqu'on prend $t = 0$ et qu'on remplace la transformation de F.B.I. par la transformation de type Bargmann :

$$T_0u(x,\xi) = \int e^{i(x-y)\xi/h - \mu(x-y)^2/h}u(y)dy\ .$$

où $\mu > 0$ est constant.

En utilisant le fait que $w = T_0u$ vérifie les conditions de type $\overline{\partial}$:

$$(hD_x - \xi)w = 2i\mu_0 hD_\xi w$$

et que $hD_x - \xi$ est formellement auto-adjoint sur $L^2(\mathbf{R}^{2n})$ alors que $2i\mu_0hD_\xi$ est formellement anti-auto-adjoint, on montre même que lorsque $P = \sum_{|\gamma|\leq d} a_\gamma(x)(hD_x)^\gamma$ est à coefficients polynomiaux, on a la formule exacte :

$$\langle e^{\psi/h}TPu, e^{\psi/h}Tv\rangle_{L^2} = \langle p_\psi(x,\xi;h)e^{\psi/h}Tu, e^{\psi/h}Tv\rangle_{L^2}$$

avec

$$p_\psi(x,\xi;h) = \sum_{|\gamma|\leq d}(\xi + 2i\mu\partial_\mu\psi + i\mu h\partial_\mu)^\gamma a_\gamma(x - \partial_\mu\psi - \frac{h}{2}\partial_\mu)(\mathbf{1})$$

$$\partial_\mu = \frac{1}{2\mu}\partial_x + i\partial_\xi\ .$$

($\mathbf{1}$ désignant la fonction constante de valeur 1).

Le fait que tout se passe bien pour T_0 est exploité dans la preuve de notre théorème pour ce qui concerne la zone où $\mu(\alpha)$ est constant. On utilise par ailleurs le fait que ψ est constante sur Supp $\nabla\mu$, et que les termes faisant intervenir $\nabla\mu$ sont d'ordre négatif.

On renvoie à [Ma 3] pour la preuve détaillée de ce théorème.

4. Applications.

Traitons d'abord l'exemple (1.2), en supposant en plus que $R(x, hD_x)$ est un opérateur différentiel à coefficients holomorphes et bornés, dans un domaine de $\mathbf{C}^n$ suffisamment grand pour que les manipulations que nous allons effectuer soient possibles.

A cause de la croissance polynomiale des potentiels, il faut également modifier un peu notre définition de $\mathbf{T}$ en remplaçant le poids $\langle \text{Re } \alpha_\xi \rangle$ partout où il intervient par :

$$\tilde{r}(\alpha) = [\langle \text{Re } \alpha_{x_n} \rangle + (\text{Re } \alpha_\xi)^2]^{1/2} .$$

Si l'on pose $G(x,\xi) = (x.\xi + 2\xi_n)\chi(\frac{\xi^2 - x_n - 1}{\langle x_n \rangle})$, où $\chi \in C_0^\infty$ vaut 1 près de 0, et si l'on note $p_1(x,\xi) = \xi^2 - x_n - 1$, on a sur $\{p_1(x,\xi) = 0\}$:

$$H_{p_1} G = 2\xi \partial_x G + \partial_{\xi_n} G = 2\xi^2 + x_n + 2 = 3x_n + 4 = 3|x_n + 1| + 1 \geq \frac{1}{C} \langle x_n \rangle \tag{4.1}$$

avec $C > 0$.

Ainsi, G est alors une fonction fuite globale pour $P_1 = -h^2\Delta - x_n - 1$ et, du fait de l'ellipticité de $P_2 = -h^2\Delta + x^2$ en dehors de 0, on peut vérifier facilement que la théorie des résonances de [He Sj] se généralise à un tel système, en prenant un poids différent sur chaque composante :

$$P : H(\Lambda_{tG}; \xi^2 + \langle x \rangle^2) \times H(\Lambda_{tG}; \tilde{r}^2) \to H(\Lambda_{tG}; 1) \times H(\Lambda_{tG}; 1)$$

(on a repris ici les notations de [He Sj], où $H(\Lambda_{tG}, m)$ désigne le complété de $C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$ pour la norme $\|m\mathbf{T}u\|_{L^2_{tG}}$).

Considérant alors une résonance $\rho(h)$ de P tendant vers 0 avec h (on peut montrer comme dans [Ma1] que de telles résonances existent), on note

$$u = (u_1, u_2) \in H(\Lambda_{tG}; \xi^2 + \langle x \rangle^2) \times H(\Lambda_{tG}; \tilde{r}^2)$$

un état résonnant associé à $\rho(h)$, et normalisé dans $H(\Lambda_{tG}; 1) \times H(\Lambda_{tG}; 1)$ par :

$$\|T_1 u_1\|^2_{L^2_{tG}} + \|T_1 u_2\|^2_{L^2_{tG}} = 1$$

où

$$T_1 u_j = \int e^{i(\alpha_x - y)\alpha_\xi / h - \mu_\lambda(\alpha)(\alpha_x - y)^2 / h} \chi_\lambda(\alpha, y) u_j(y) dy .$$

Posons, pour $\mu_0 > 0$ fixé :

$$\psi_{\mu_0}(x,\xi) = \frac{2\mu_0 x^2 + \xi^2}{2(2\mu_0 + 1)}$$

et

$$S(\mu_0) = \inf\{\psi_{\mu_0}(x,\xi)\ ;\ (x,\xi) \in \mathbf{R}^{2n}, p_1(x,\xi) = 0\}$$

un calcul élémentaire permet de maximaliser $S(\mu_0)$ en prenant $\mu_0 = \frac{1+\sqrt{5}}{4}$ qui donne $S(\mu_0) = S_0 = \frac{3-\sqrt{5}}{4}$. On cherche maintenant à appliquer (3.3) à Pu, en prenant

$$\psi(\alpha) = (1-\varepsilon)[\widetilde{\chi}(\alpha)\psi_{\mu_0}(\alpha) + (1-\widetilde{\chi}(\alpha))(S_0 - \varepsilon)]$$

où $\varepsilon > 0$ est arbitrairement petit, $\widetilde{\chi} \in C_0^\infty(\{p_1(x,\xi) < 0\}; [0,1])$, $|\psi_{\mu_0}(x,\xi) - S_0| \le \varepsilon$ sur Supp $\nabla\widetilde{\chi}$. En fait, on peut même s'arranger pour que $\widetilde{\chi}$ vérifie :

$$|\psi_{\mu_0}(x,\xi) - (S_0 - \varepsilon)|.\ |\nabla\widetilde{\chi}| \le \varepsilon^2.$$

D'autre part, on peut aussi supposer que Supp G est suffisamment voisin de $\{p_1(x,\xi) = 0\}$ pour que l'on ait :

$$\text{Supp } \widetilde{\chi} \cap \text{Supp } G = \varnothing\ .$$

En particulier, on obtient (en notant $(x,\xi) = \text{Re } \alpha$) :

$$\partial_{\mu,t}\psi(\alpha) = \partial_{\mu_0}\psi(\alpha) = \frac{1}{2\mu_0}\partial_x\psi + i\partial_\xi\psi = (1-\varepsilon)\frac{x+i\xi}{2\mu_0+1}\chi(x,\xi) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

(où le $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ est supporté en dehors de 0), et donc, pour $(x,\xi) \in$ Supp $\nabla\psi$, et en notant $\theta = (1-\varepsilon)\chi(x,\xi) \in [0, 1-\varepsilon]$:

$$p_2(x - \partial_{\mu,t}\psi\ ,\ \xi + 2i\mu_0\partial_{\mu,t}\psi) =$$

$$\frac{1}{(2\mu_0+1)^2}[((2\mu_0 + 1 - \theta)x - i\theta\xi)^2 + ((2\mu_0 + 1 - 2\theta\mu_0)\xi + 2i\mu_0\theta x)^2]$$

$$+\mathcal{O}(\varepsilon^2(x^2+\xi^2))$$

d'où l'on déduit pour ε assez petit :

$$\text{Re } p_2(x - \partial_{\mu,t}\psi, \xi + 2i\mu_0\partial_{\mu,t}\psi) \ge \frac{1-\theta^2}{(2\mu_0+1)^2}(4\mu_0^2x^2 + \xi^2) + \mathcal{O}(\varepsilon^2(x^2+\xi^2))$$

$$\ge \frac{\varepsilon}{(2\mu_0+1)^2}(4\mu_0^2x^2 + \xi^2). \tag{4.2}$$

On a aussi, toujours sur Supp $\nabla\psi$:

$$(2\mu_0+1)^2\text{Re } p_1(x - \partial_{\mu,t}\psi\ ,\ \xi + 2i\mu_0\partial_{\mu,t}\psi) = (2\mu_0(1-\theta)+1)^2\xi^2 - 4\mu^2\theta^2x^2$$

$$-(2\mu_0+1)(2\mu_0+1-\theta)x_n - (2\mu_0+1)^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$= (2\mu_0(1-\theta)+1)^2(\xi^2 - x_n - 1) - 4\mu_0^2\theta^2x^2$$

$$-(4\mu_0^2\theta(2-\theta) + 2\mu_0\theta - \theta)x_n - 4\mu_0^2\theta(2-\theta) - 4\mu_0\theta + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

et donc, du fait que $\xi^2 - x_n - 1 < 0$ et, pour tout $x_n \geq -1$:

$$(4\mu_0^2(2-\theta) + 2\mu_0 - 1)x_n + 4\mu_0^2(2-\theta) + 4\mu_0 \geq 2\mu_0 + 1$$

(où l'on a utilisé le fait que $4\mu_0^2 + 2\mu_0 - 1 > 0$ pour $\mu_0 = \frac{1+\sqrt{5}}{4}$) on en déduit :

$$\text{Re } p_1(x - \partial_{\mu,t}\psi \ , \ \xi + 2i\mu_0\partial_{\mu,t}\psi) < 0 \quad \text{sur} \quad \text{Supp } \nabla\psi \ .$$

D'autre part, sur $\Lambda_{tG} \setminus \text{Supp } \nabla\psi$, on a grâce à (4.1) :

$$|p_1(\alpha)| \geq \frac{1}{C}\tilde{r}(\alpha)^2$$

et aussi :

$$|p_2(\alpha)| \geq \langle \text{Re } \alpha\rangle^2 \ .$$

La généralisation de (3.3) au cas de coefficients à croissance polynômiale donne alors, du fait que $Pu = \rho u$:

$$\|\tilde{r}(\alpha)^2 e^{\psi/h}\mathbf{T}u_1\|^2_{L^2_{tG}} + \||\text{Re } \alpha|^2 e^{\psi/h}\mathbf{T}u_2\|^2_{L^2_{tG}}$$

$$= \mathcal{O}(|\rho(h)| + h)\{\|\tilde{r}(\alpha)^2 e^{\psi/h}\mathbf{T}u_1\|^2_{L^2_{tG}} + \|\langle\text{Re } \alpha\rangle^2 e^{\psi/h}\mathbf{T}u_2\|^2_{L^2_{tG}}$$
$$+ \|u\|^2_{H^s_\delta}\}$$

D'où l'on déduit, en séparant les zones $\{|\text{Re } \alpha|^4 \geq C(|\rho(h)| + h)\}$ et $\{|\text{Re } \alpha|^4 \leq C(|\rho(h)| + h)\}$ ($C > 0$ fixé assez grand) :

$$\forall \varepsilon' > 0 \ , \ \|e^{\psi/h}\mathbf{T}u\|_{L^2_{tG}} = \mathcal{O}(e^{\varepsilon'/h}) \ . \tag{4.3}$$

En particulier, si l'on s'arrange aussi pour que $\tilde{\chi} = 1$ sur $\{\psi_{\mu_0} \leq S_0 - \varepsilon\}$:

$$\|(1 - \tilde{\chi}(\text{Re } \alpha))\mathbf{T}u\|_{L^2_{tG}} = \mathcal{O}(e^{-(S_0 - \eta(\varepsilon))/h}) \tag{4.4}$$

avec $\eta(\varepsilon) \to 0 \quad (\varepsilon \to 0_+)$.

On utilise ensuite un inverse à gauche approché de $\mathbf{T}$, noté $\mathbf{S}$, que l'on construit d'une manière analogue à celle de [He Sj] mais en utilisant la troncature $\chi_\lambda(\alpha, y)$.

Pour $\check{\chi} = \check{\chi}(\text{Re } \alpha) \in C_0^\infty(\mathbf{R}^{2m})$, $\check{\chi} = 1$ sur Supp $\tilde{\chi}$, on pose

$$v = \mathbf{S}(\check{\chi}(\text{Re } \alpha)\mathbf{T}u) \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n),$$

qui vérifie

$$\|\mathbf{T}(v - u)\|_{L^2_{tG}} = \|\mathbf{TS}(1 - \check{\chi})\mathbf{T}u\|_{L^2_{tG}} + \mathcal{O}(e^{-S_\lambda/h})\|\mathbf{T}u\|_{L^2_{tG}}$$
$$= \mathcal{O}(e^{-(S_0 - \eta)/h}) \ .$$

En choisissant $\check{\chi}$ de telle sorte que $\check{\chi} = 1$ dans $d((\alpha_x, \alpha_\xi)\ ; \mathrm{Supp}\ \widetilde{\chi}) \leq C\lambda$ avec $C > 0$ assez grand, on a aussi :

$$\|\widetilde{\chi}\mathbf{TS}(1-\check{\chi})\mathbf{T}u\|_{L^2_{tG}} = \mathcal{O}(e^{-2S_\lambda/h})$$

Alors, modulo des termes $\mathcal{O}(e^{-2(S_0-\eta)/h})$, on a :

$$\rho = \langle T_1 Pu\ ,\ T_1 u\rangle_{L^2_{tG}} \equiv \langle T_1 Pu\ ,\ T_1 u\rangle_{L^2(\mathrm{Supp}\ \widetilde{\chi})}$$

$$\equiv \langle T_1 Pv\ ,\ T_1 v\rangle_{L^2(\mathrm{Supp}\ \widetilde{\chi})}.$$

Or $\mu(\alpha) = \mu_0$ sur Supp $\widetilde{\chi}$. Si l'on définit

$$T_0 v(x,\xi) = \int e^{i(x-y)\xi/h - \mu_0(x-y)^2/h} v(y)dy$$

on vérifie qu'alors

$$\|T_0 v\|_{L^2(\mathrm{Supp}\ \widetilde{\chi})} \equiv \|T_1 v\|_{L^2(\mathrm{Supp}\ \widetilde{\chi})}$$

$$\|T_0 v\|_{L^2(\mathbf{R}^{2n})} = \|T_0 v\|_{L^2(\mathrm{Supp}\ \widetilde{\chi})} + \mathcal{O}(e^{-(S_0-\eta)/h})$$

avec ici $\eta = \eta(\varepsilon, t) \to 0 \quad (\varepsilon, t \to 0)$ et l'on obtient :

$$\rho \equiv \langle T_0 Pv\ ,\ T_0 v\rangle_{L^2(\mathbf{R}^{2n})} = c(h)\langle Pv, v\rangle_{L^2(\mathbf{R}^n)}$$

$$= c(h)\langle v, Pv\rangle_{L^2(\mathbf{R}^n)} = \langle T_0 v, T_0 Pv\rangle_{L^2(\mathbf{R}^{2n})} \equiv \bar{\rho} \tag{4.5}$$

où $c(h)$ est une constante explicite de la forme $c_n h^m$. (4.5) montre donc que dans ce cas :

$$\forall \varepsilon > 0, \qquad |\mathrm{Im}\ \rho(h)| = \mathcal{O}(e^{-2(S_0-\varepsilon)/h})$$

avec $S_0 = \frac{3-\sqrt{5}}{4}$.

On peut généraliser l'exemple précédent à des systèmes du type

$$P = \begin{pmatrix} -h^2\Delta + V_1(x) & 0 \\ 0 & -h^2\Delta + V_2(x) \end{pmatrix} + hR(x, hD_x)$$

avec R comme avant, et V_1, V_2 à croissance polynomiale vérifiant

$$V_2 \geq 0\ ,\ V_2^{-1}(0) = \{0\}\ ,\ V_2''(0) > 0, \lim_{|x| \to \infty} V_2(x) > 0 \tag{4.6}$$

$$V_1(0) < 0$$

et $\xi^2 + V_1(x)$ admettant une fonction fuite globale dans le sens de [He Sj]. (Bien entendu, V_1 et V_2 sont également supposés holomorphes dans un domaine assez grand de $\mathbf{C}^n$).

Notant $d_2(x)$ la distance d'Agmon de x à 0, associée à la métrique dégénérée $V_2(x)dx^2$, on pose cette fois :

$$\varphi_{\mu_0}(x,\xi) = V.C._y[(x-y)\xi + i\mu_0(x-y)^2 + id_2(y)] \tag{4.7}$$

$$\psi_{\mu_0} = \text{Im } \varphi_{\mu_0}$$

où $V.C._y$ signifie que l'on prend la valeur critique par rapport à la variable y. ψ_{μ_0} est alors bien définie près de 0, et l'on vérifie que $\widetilde{\varphi}_{\mu_0}(x,\xi) \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_{\mu_0}(x,\xi) - \frac{i}{4\mu_0}\xi^2$ dépend holomorphiquement de $z = 2\mu_0 x - i\xi$. Considérant alors l'ensemble $\mathcal{E}$ des ouverts Ω de $\mathbf{R}^{2n}$ vérifiant :

$$\begin{cases} 0 \in \Omega \subset \{p_1(x,\xi) < 0\} \\ \widetilde{\varphi}_{\mu_0} \quad \text{se prolonge holomorphiquement à} \quad \{2\mu x - i\xi ; (x,\xi) \in \Omega\}, \end{cases}$$

on pose pour $\Omega \in \mathcal{E}$:

$$\theta(\Omega,\mu_0) = \sup\{t > 0 \ ; \ \forall s \in [0,t], \exists C > 0 \quad \text{tel que} \quad \forall (x,\xi) \in \Omega :$$

$$|p_1(x - s\partial_{\mu_0}\psi_{\mu_0}, \xi + 2is\mu_0\partial_{\mu_0}\psi_{\mu_0})| \geq \frac{1}{C}$$

$$|p_2(x - s\partial_{\mu_0}\psi_{\mu_0}, \xi + 2is\mu_0\partial_{\mu_0}\psi_{\mu_0})| \geq \frac{x^2+\xi^2}{C}\} \ .$$

Le choix (4.7) de la fonction ψ_{μ_0} se justifie par le fait que l'on a sur tout $\Omega \in \mathcal{E}$:

$$p_2(x - \partial_{\mu_0}\psi_{\mu_0} \ , \ \xi + 2i\mu_0\partial_{\mu_0}\psi_{\mu_0}) = 0$$

et aussi

$$\theta(\Omega,\mu_0) \to 1 \text{ lorsque diam } (\Omega) \to 0 \quad (\Omega \in \mathcal{E}).$$

On vérifie facilement que l'on a toujours $\theta(\Omega,\mu_0) \in]0,1]$, et le résultat de l'exemple précédent se généralise avec :

$$S_0 = \sup_{\mu_0>0} \sup_{\Omega\in\mathcal{E}} \inf_{(x,\xi)\in\partial\Omega} \theta(\Omega,\mu_0)\psi_{\mu_0}(x,\xi).$$

Références :

[He Sj] B. Helffer, J. Sjöstrand : Résonances en limite semi-classique, Mémoire S.M.F. n° 24/25 (1986).

[KMSW] M. Klein, A. Martinez, R. Seiler, X.P. Wang : On the Born-Oppenheimer Expansion for Polyatomic Molecules, Comm. Math. Phys. 143, 607-639, (1992).

[Ma] A. Martinez

[1] Résonances dans l'approximation de Born-Oppenheimer I, J. Diff. Eq. Vol. 91, n°2 (1991).

[2] Résonances dans l'approximation de Born-Oppenheimer II, largeur des résonances, Comm. Math. Phys. 135, 517-530 (1991).

[3] Estimates on complex Interactions in Phase Space, Preprint Paris XIII.

[Me] B. Messirdi : Thèse en préparation.

URA 742 C.N.R.S.

Institut Galilée

Département de Mathématiques

Université Paris-Nord

93430 Villetaneuse (France)