

SÉMINAIRE ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES – ÉCOLE POLYTECHNIQUE

M. ROULEUX

Résonances de Feshbach en limite semi-classique

Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1995-1996), exp. n° 19,
p. 1-11

<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1995-1996____A19_0>

© Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)
(École Polytechnique), 1995-1996, 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/>

*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 ; Télég 601.596 F

Séminaire 1995-1996

EQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES

RESONANCES DE FESCHBACH EN LIMITE SEMI-CLASSIQUE

M. ROULEUX

Exposé n° XIX

9 Avril 1996

0. INTRODUCTION

On va présenter dans cet exposé quelques résultats concernant les résonances d'un opérateur h -Pseudo-Différentiel sur $L^2(\mathbf{R}^+) \otimes \mathbf{C}^2$, avec condition de Dirichlet en $x = 0$, lorsque la variété caractéristique présente une intersection conique. Notre objectif est d'établir l'existence de ces résonances et de les analyser en termes aussi géométriques que possible, comme par exemple des intégrales d'action. On se restreint ici à des croisements presque évités.

De tels systèmes interviennent de façon naturelle dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer pour expliquer la transition des noyaux d'une molécule diatomique entre deux niveaux électroniques. Rappelons que dans l'approximation de Born-Oppenheimer les états électroniques dépendent de la variable de position internucléaire $x \in \mathbf{R}^3 \setminus 0$ comme d'un paramètre ; à leur tour, les niveaux d'énergie, ou termes électroniques, agissent sur les noyaux comme un potentiel effectif en général matriciel ; à cause de leur masse (ici le petit paramètre h est la racine carrée du rapport des masses des électrons à celle des noyaux,) ceux-ci évoluent suivant un comportement semi-classique relevant du calcul h -Pseudo-Différentiel. Cette approximation est justifiée mathématiquement dans la plupart des cas : états liés ([CoDuSe], [KIMaSeWa], ...), états de diffusion ([Ra], [KIMaWa], ...), et résonances ([Ma1], [MaMes] ...).

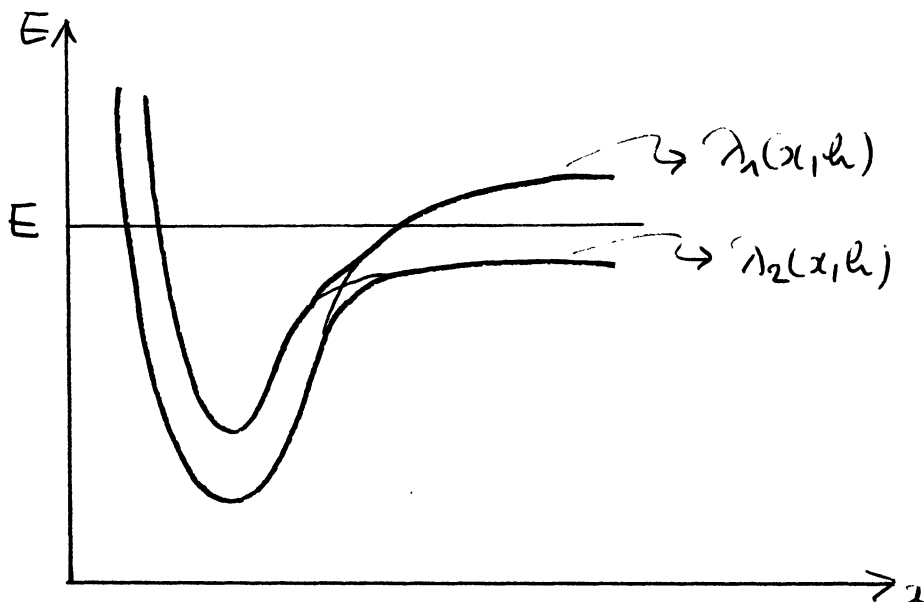
Particulièrement importantes d'un point de vue physique sont les transitions, par effet tunnel, d'un canal fermé vers un canal ouvert *via* une intersection des termes électroniques ; si ces termes appartiennent à la même représentation irréductible du groupe de symétrie du hamiltonien, il ne peut s'agir en fait, selon le théorème de Wigner et von Neumann ([LaLi]) que d'un croisement évité.

Pour décrire ce phénomène, appelé prédissociation moléculaire, on dispose de deux approches : la première est basée sur la propagation d'états cohérents pour l'équation de Schrödinger dépendant du temps ([Ha], [HaJo], ...) Au temps $-T$, où $T = \mathcal{O}(h^{-1})$, on prépare un paquet d'ondes (relatives aux noyaux,) dans un canal du hamiltonien effectif, par exemple le canal fermé ; cet état cohérent évolue approximativement suivant l'équation de Liouville le long du même canal tant que les courbes électroniques sont suffisamment distantes l'une de l'autre (évolution adiabatique.) A la rencontre du croisement, il se scinde en deux paquets, dont l'un va évoluer désormais le long du canal ouvert, jusqu'au temps T . Pour une distance entre les termes électroniques de l'ordre de $\sqrt{h}$, on peut calculer la probabilité de transition du canal fermé vers le canal ouvert ; on trouve en fait le même résultat qu'en appliquant formellement les formules de Landau Zener ([JaSe], [Jo], ...)

L'autre approche que nous empruntons ici consiste à étudier le problème spectral en fixant une énergie E dans le spectre continu du hamiltonien moléculaire (ou du hamiltonien effectif,) et à chercher les résonances du système voisines de E dans la limite semi-classique $h \rightarrow 0$. Le dessin ci-dessous décrirait la situation si les "potentiels effectifs" étaient donnés par les deux courbes électroniques $\lambda_1(x, h)$ et $\lambda_2(x, h)$. En réalité, le hamiltonien effectif dérivé de l'approximation de Born-Oppenheimer a une forme plus compliquée ; il s'agit d'un opérateur h -Pseudo-Différentiel dont les valeurs propres du symbole principal, au premier ordre en h , pas trop près du croisement, et au terme d'énergie cinétique près, sont $\lambda_1(x, h)$ et $\lambda_2(x, h)$. Il est naturel de considérer un paramètre supplémentaire μ qui mesure la distance entre les deux composantes de la variété caractéristique, et dont l'ordre de grandeur, si l'on s'intéresse à des croisements évités, peut dépendre de h , comme par exemple $\mu \geq Ch^\delta$, avec $\delta > 0$.

Assez curieusement, le cas le plus abondamment traité dans la littérature est celui de

croisements franchement évités dans le domaine réel, i.e. $\delta = 0$. Des modèles ont été analysés dans [Ba], [DMe], [Me], [Na], [N] ... et la situation la plus générale, (la mieux en rapport aussi avec l'approximation de Born-Oppenheimer puisqu'elle traite du cas à plusieurs dimensions,) par Martinez [Ma2], dont les calculs utilisent la théorie microlocale des résonances de [HeSj1]. Ces auteurs obtiennent essentiellement des majorations de la largeur des résonances qui s'interprètent comme dans les formules de Landau-Zener. Sjöstrand [Sj3] a produit récemment une théorie très élaborée de déformations lagrangiennes qui pourrait rendre compte encore plus précisément des interactions dans le domaine complexe entre les composantes d'énergie de la variété caractéristique du hamiltonien effectif. Un panorama des résultats les plus récents, ainsi que l'idée géométrique de "résonances par correspondance", sont développés dans [Gr]. Notons que contrairement au cas des croisements presque évités que nous allons considérer, pour lesquels les surfaces de Riemann sont faciles à analyser, il n'y pas là de façon très simple ni très naturelle de rejoindre les deux composantes de la variété caractéristique dans le domaine complexe. C'est évidemment un aspect de l'effet tunnel dans l'espace des phases (cf [Sj3] pour une revue de ces problèmes.)



La seule référence en rapport avec ce travail que nous ayons trouvée sont les articles des Physiciens Korsch et Möhlenkamp ([MöKo], [Ko] ...) Nous leur empruntons la terminologie "résonances de Feshbach". Notons que ces auteurs obtiennent une condition de quantification assez semblable à la nôtre (cf Théorème 2) mais n'ont aucune information sur la largeur des résonances.

Nous devons signaler cependant que le problème abordé ici, comme d'ailleurs dans beaucoup d'études faites sur ce sujet, *n'est pas* vraiment celui de l'approximation de Born-Oppenheimer, dans la mesure où nous nous sommes limités, pour des raisons complètement inhérentes à notre méthode, à la dimension 1 d'espace. Il prendrait une réelle signification physique dès lors que l'on pourrait décomposer le hamiltonien effectif en coordonnées sphériques, ce qui peut paraître naturel étant donnée l'invariance par rotations du hamiltonien moléculaire (dans le cas de la molécule diatomique.) Ce point toutefois n'est pas du tout clair (au moins pour l'auteur!) et lié à la complexité topologique de l'espace vectoriel fibré, de base $x \in \mathbf{R}^3 \setminus 0$, des fonctions d'ondes électroniques: d'une part ce fibré n'est pas

trivial (dans le cas de potentiels coulombiens,) et même s'il l'était, il pourrait ne pas contenir suffisamment de sections invariantes par rotations. (On renvoie à [ShWi] pour une discussion de ces aspects topologiques; le cas plus simple du bas du spectre a été traité dans [KlMaSeWa] et [So].)

Nous décrivons à présent nos résultats de façon plus précise.

1. LE HAMILTONIEN

Soient $a(x, \xi, \mu, h) = a_0(x, \xi, \mu) + ha_1(x, \xi, \mu) + \dots$, $b(x, \xi, \mu, h) = b_0(x, \xi, \mu) + \dots$ et $f(x, \xi, \mu, h) = f_0(x, \xi, \mu) + \dots$ des symboles analytiques classiques définis pour $(x, \xi) \in T^*\mathbf{R}^+$ et dépendant aussi analytiquement d'un petit paramètre complexe μ qui, comme on l'a vu plus haut, doit mesurer l'"épaisseur" du croisement évité. En même temps, c'est le paramètre spectral; il s'agira donc de quantifier μ . Considérons l'opérateur h -Pseudo-différentiel (OPD en abrégé)

$$\mathcal{P}(x, hD_x, \mu, h) = \begin{pmatrix} a^w + f^w & b^w \\ b^{w*} & -a^w + f^w \end{pmatrix} (x, hD_x, \mu, h)$$

où a^w , etc... désigne la quantification de Weyl. On suppose:

$$(H.1) \quad a, f \text{ and } b_0 \text{ sont analytiques réels}$$

Ainsi, $\mathcal{P}$ est formellement auto-adjoint et a un symbole principal réel $\mathcal{P}_0$ lorsque μ est réel. On fait des hypothèses supplémentaires pour s'assurer que $\mathcal{P}$ admette une extension auto-adjointe sur $L^2(\mathbf{R}^+) \otimes \mathbf{C}^2$ et admette une distorsion analytique au sens de Hunziker ([Hu]. [HeMa], ...). Plus précisément, pour μ dans un voisinage complexe $\mathcal{V}(0)$ de 0. supposons que:

$(x, \xi) \rightarrow \mathcal{P}(x, \xi, \mu, h)$ se prolonge holomorphiquement dans un secteur:

$$(H.2) \quad \Omega = \{(x, \xi) \in \mathbf{C}^2 : \operatorname{Re} x > 0, |\operatorname{Im} x| \leq \operatorname{Re} x/C, |\operatorname{Im} \xi| \leq (1 + |\operatorname{Re} \xi|)/C\}, C > 0$$

$(x, \xi) \rightarrow \mathcal{P}(x, \xi, \mu, h)$ est bornée dans Ω

On a supposé en particulier que $\mathcal{P}$ est borné quand $x \rightarrow 0$; on peut sans doute admettre des singularités comme x^{-2} (pour tenir compte du fait que le hamiltonien serait obtenu par un passage en coordonnées sphériques,) mais les résultats de [KlMaSeWa], [MaMe] montrent que l'on peut, de toute manière, régulariser les potentiels sans changer les résonances d'une quantité appréciable. Cette hypothèse n'est donc pas très restrictive. Ecrivant (au niveau du symbole complet de Weyl:)

$$\mathcal{P}(x, \xi, \mu, h) = \xi^2 I + \mathcal{M}(x, \xi, \mu, h)$$

on suppose qu'il existe une matrice 2×2 hermitienne $\mathcal{M}_0(\mu, h)$ de symboles analytiques classiques d'ordre 0, dont les valeurs propres $\lambda^{(1)}(\mu, h)$ et $\lambda^{(2)}(\mu, h)$ vérifient:

$$(H.3) \quad \lambda^{(2)}(\mu, h) < 0 < \lambda^{(1)}(\mu, h)$$

uniformément pour $h > 0$ assez petit, $\mu \in \mathcal{V}(0)$ et telle que:

$$(H.4) \quad \mathcal{M}(x, \xi, \mu, h) \rightarrow \mathcal{M}_0(\mu, h) \quad \text{as } |(x, \xi)| \rightarrow \infty, (x, \xi) \in \Omega$$

On s'intéresse aux résonances près du niveau d'énergie $E = 0$; la valeur propre $\lambda^{(2)}(\mu, h)$ est le seuil du canal ouvert à l'énergie E . A cause de l'hypothèse (H. 4), les valeurs propres $\lambda_0^{(1)}$ et $\lambda_0^{(2)}$ de $\mathcal{M}_0(x, \xi, \mu)$ (le symbole principal de $\mathcal{M}(x, \xi, \mu, h)$) sont non dégénérées et dépendent analytiquement de $(x, \xi) \in \Omega$ pour $|(x, \xi)|$ assez grand. Soit $\lambda_0^I(x, \xi, \mu) = \xi^2 + \lambda_0^{(1)}(x, \xi, \mu)$ et $\lambda_0^{II}(x, \xi, \mu) = \xi^2 + \lambda_0^{(2)}(x, \xi, \mu)$. On suppose que l'énergie $E = 0$ est non captive pour $\lambda_0^{II}(x, \xi, \mu)$, c'est-à-dire qu'il existe une fonction fuite régulière $G(x, \xi, \mu)$ au sens de [HeSj1] telle que :

$$(H.5) \quad \{\lambda_0^{II}(x, \xi, \mu), G(x, \xi, \mu)\} \geq \delta_0 > 0 \text{ sur } \{(x, \xi) \in T^*\mathbf{R}^+ : x \geq R, \lambda_0^{II}(x, \xi, \mu) = 0\}$$

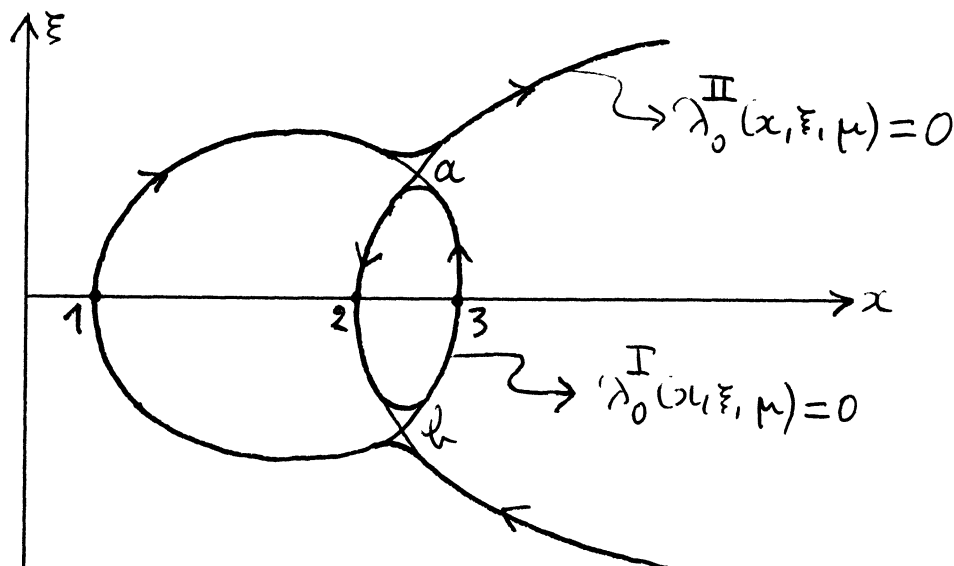
pour certains $\delta_0 > 0$ et $R > 0$; ici $\{\cdot, \cdot\}$ denote le crochet de Poisson. La fonction de fuite $G(x, \xi, \mu)$ est choisie de telle manière que $G(x, \xi, \mu) = x\xi + o(1)$ lorsque $(x, \xi) \in \Omega, |(x, \xi)| \rightarrow \infty$. Sur $\lambda_0^I(x, \xi, \mu)$ on impose une condition naturelle d'ellipticité, e.g.

$$(H.6) \quad \begin{aligned} K^I &= \{(x, \xi) : \lambda_0^I(x, \xi, \mu) = 0\} \text{ est compact} \\ |\lambda_0^I(x, \xi, \mu)| &\geq C(1 + |\xi|^2) \text{ en dehors de tout voisinage de } K^I, \quad C > 0. \end{aligned}$$

Le second groupe d'hypothèses concerne la variété caractéristique de $\mathcal{P}$ dans le domaine $0 < x < R$ défini par :

$$\text{Char}\mathcal{P} = \{(x, \xi) \in T^*\mathbf{R}^+ : \det \mathcal{P}_0(x, \xi, \mu) = 0\}$$

On suppose que $\det \mathcal{P}_0(x, \xi, \mu)$ satisfait aussi une estimation comme dans (H.6) en dehors de tout voisinage de $\text{Char } \mathcal{P}$ et que pour $\mu = 0$, $\text{Char } \mathcal{P}$ est la réunion de 2 courbes connexes réelles analytiques comme dans la figure:



avec des points de branchement $a = (x_0, \xi_0)$, $b = (x'_0, \xi'_0)$ et des points tournants simples **1**, **2** et **3**. Pour $\mu \neq 0$, les croisements s'évitent (dans le domaine réel) le long des lignes en traits gras. (C'est le cas physiquement intéressant, comme le montre le premier dessin, et doit être considéré comme une hypothèse ; apparemment, les croisements pourraient s'éviter à gauche et à droite du point de branchement.) Pour μ réel et assez petit, il y a toujours 3 points tournants que l'on continue de noter **1**(μ), **2**(μ) et **3**(μ). On utilise la même notation

quand μ devient complexe. Dans la suite, on aura besoin de modifier légèrement la variété caractéristique d'une quantité (complexe) $\mathcal{O}(h)$, pour prendre aussi en compte le symbole sous-principal de $\mathcal{P}$, dans un sens qui devrait devenir clair par la suite (cf. aussi [HeSj2. App.b]).) Alors, $\mathbf{1} = \mathbf{1}(\mu, h)$, etc... dénoteront les nouveaux points tournants. ou leur prolongement analytique. Les flèches désignent l'orientation du flot hamiltonien.

Par souci de simplicité, on supposera si nécessaire que $\mathcal{P}$ est invariant par conjugaison complexe pour μ réel:

$$(H.7) \quad \mathcal{P}(x, hD_x, \mu, h)\Gamma = \Gamma\mathcal{P}(x, hD_x, \mu, h), \quad \mu \in \mathbf{R}$$

où l'opérateur antilinéaire Γ quantifie la réflexion κ_Γ sur l'axe des x . En particulier, a et b sont symétriques ; $\kappa_\Gamma(a) = b$ et $\kappa_\Gamma(j) = j, j \in \{\mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}\}$. L'hypothèse (H.7) signifie que ξ n'apparaît dans le symbole de Weyl de $\mathcal{P}$ que par l'intermédiaire du terme cinétique ξ^2 : cette restriction est sans gravité en dimension 1, mais elle serait sans doute plus sérieuse en dimension supérieure: on sait en effet [ShWi] que dans l'approximation de Born-Oppenheimer. on doit en général remplacer ξ^2 par $(\xi + hA(x))^2$ où $A(x)$ est un potentiel vecteur qui provient du fait que les fonctions d'ondes électroniques ne sont pas réelles, et dont il n'est pas possible de se débarrasser par un simple changement de jauge. Toutefois, cette hypothèse peut être sans doute supprimée, même si c'est au prix de certaines complications techniques. On formule à présent notre dernier groupe d'hypothèses relatives aux points de branchement (cf. [KaRo].)

Pour $\mu = 0$, on demande que 0 soit une valeur propre double de $\mathcal{P}_0$. En d'autres termes, comme $\mathcal{P}_0$ est réel symétrique, on a $\mathcal{P}_0 = 0$ ou :

$$(H.8) \quad a_0(x, \xi, \mu) = b_0(x, \xi, \mu) = f_0(x, \xi, \mu), \quad (x, \xi, \mu) = (x_0, \xi_0, 0)$$

Le comportement local de $\det \mathcal{P}$ est donné par la condition d'hyperbolicité

$$(H.9) \quad (x, \xi) \rightarrow \det \mathcal{P}_0(x, \xi, 0) \quad \text{a un point selle non dégénéré en } a \text{ et } b$$

Sous la simple hypothèse :

$$da_0 \text{ et } db_0 \text{ sont linéairement indépendants en } (x, \xi, \mu) = (x_0, \xi_0, 0)$$

les croisements ont lieu (localement) le long de la courbe $M = \{\rho = (x, \xi, \mu) \in \mathbf{R}^3 | a_0 = b_0 = 0\}$. Sauf pour le Théorème 1 on va supposer que l'on est dans le cas général:

$$(H.10) \quad da_0, db_0, \text{ and } df_0 \text{ sont linéairement indépendants en } (x, \xi, \mu) = (x_0, \xi_0, 0).$$

Sous cette condition, on a une intersection conique de $\text{Char } \mathcal{P}$ le long de M . En d'autres termes, pour $\lambda \in \mathbf{R}$, $|\lambda|$ assez petit, les ensembles $\mathcal{C}_\lambda^\pm = \{\rho \in \mathbf{R}^3 : f_0 \pm (a_0^2 + b_0^2)^{1/2} = \lambda\}$ ont une intersection conique le long de M au point $\rho = (x_\lambda, \xi_\lambda, \mu_\lambda)$ et $\det \mathcal{P}_0(\rho)$ s'annule à l'ordre 2 précisément en ce point. Alors, (H.9) montre que la surface $\mu = \mu_\lambda$ coupe localement les 2 nappes du "cône" $\mathcal{C}_\lambda^+ \cup \mathcal{C}_\lambda^-$. Remarquons qu'il s'agit là du type le plus simple des croisements de codimension 2 (cf. [Be], [Ha],...)

Avant d'énoncer le principal résultat de cette section, on rappelle quelques notions d'analyse microlocale en se référant à [Sj1], [HeSj2] pour le calcul Fourier intégral et h -Pseudo-différentiel dans le cadre analytique.

On utilisera la théorie locale dans les espaces de Sjöstrand $H_{\Phi, x_0}^{\text{loc}}$, où $x_0 \in \mathbf{C}$ et $\Phi(x) = (\text{Im } x)^2/2$ est la fonction poids associée à la transformation de Bargmann unitaire standard :

$$Tu(x, h) = c_h \int e^{-(x-y)^2/2h} u(y) dy, \quad u \in C_0^\infty(\mathbf{R})$$

On identifie la variété totalement réelle $\Lambda_\Phi = \{\eta = \frac{2}{i} \frac{\partial \Phi}{\partial y}(y) : y \in \mathbf{C}\} \subset T^*\mathbf{C}$ avec l'espace de phases réel $T^*\mathbf{R} = \{(\text{Re } y, -\text{Im } y) : y \in \mathbf{C}\}$. Les germes d'opérateurs intégraux de Fourier à “transformation canonique réelle” sont alors définis de la façon suivante. Soit $\varphi(x, y, \theta)$ une fonction de phase holomorphe définie dans un voisinage complexe de $(x_0, y_0, \theta_0) \in \mathbf{C} \times \mathbf{C} \times \mathbf{R}^N$, non dégénérée au sens de Hörmander. Supposons que $(x_0, y_0, \theta_0) \in C_\varphi$ (l'ensemble critique,) et $\eta_0 = -\varphi'_y(x_0, y_0, \theta_0)$, $\xi_0 = \varphi'_x(x_0, y_0, \theta_0)$. Supposons aussi que la variété lagrangienne associée Λ_φ soit le graphe d'une transformation canonique (complexe) κ et $\eta_0 = \frac{2}{i} \frac{\partial \Phi}{\partial y}(y_0)$. On dit que κ est une “transformation canonique réelle” si localement $\kappa(\Lambda_\Phi) = \Lambda_\Phi$. Alors $\kappa(y_0, \eta_0) = (x_0, \xi_0)$ où $\xi_0 = \frac{2}{i} \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x_0)$. Si $a(x, y, \theta, h)$ est un symbole analytique classique, on peut définir l'OIF

$$Au(x, h) = (2\pi h)^{-N} \int \int e^{i\varphi(x, y, \theta)/h} a(x, y, \theta, h) u(y, h) dy \wedge d\theta$$

comme opérateur $A : H_{\Phi, y_0}^{\text{loc}} \rightarrow H_{\Phi, x_0}^{\text{loc}}$, en choisissant un contour d'intégration convenable passant par le point critique, et introduisant des fonctions de troncature dans l'intégrale. Dire que κ est une “transformation canonique réelle” revient bien sûr au même que de dire que κ “envoie le réel sur le réel”, mais il convient d'insister sur le fait qu'on aura besoin dans la suite de modifier ces transformations canoniques d'une quantité complexe $\mathcal{O}(h)$, pour tenir compte du symbole sous-principal de $\mathcal{P}$.

Soit alors $\mathcal{P}(x, hD_x, h)$ un OPD sur $H_{\Phi, x_0}^{\text{loc}} \otimes \mathbf{C}^2$.

Définition: On dit que $\mathcal{P}(x, hD_x, h)$ est microlocalement équivalent à $\tilde{\mathcal{P}}(x, hD_x, h) : H_{\Phi, y_0}^{\text{loc}} \otimes \mathbf{C}^2 \rightarrow H_{\Phi, y_0}^{\text{loc}} \otimes \mathbf{C}^2$ ssi, pour $h > 0$ assez petit, il existe une matrice inversible 2×2 d'OIF $\mathcal{A} : H_{\Phi, y_0}^{\text{loc}} \otimes \mathbf{C}^2 \rightarrow H_{\Phi, x_0}^{\text{loc}} \otimes \mathbf{C}^2$ tels que $\tilde{\mathcal{P}} = \mathcal{A}^* \mathcal{P} \mathcal{A}$ modulo les opérateurs négligeables. Ici $\mathcal{A} = (A_{i,j})_{1 \leq i, j \leq 2}$ où les OIF $A_{i,j}$ sont tous associés à la même “transformation canonique réelle” κ telle que $\kappa(y_0, \eta_0) = (x_0, \xi_0)$.

Pour simplifier l'écriture, on travaillera désormais avec des opérateurs formels définis sur $T^*\mathbf{R}$, mais tout aura un sens au niveau des réalisations dans les espaces $H_{\Phi, y_0}^{\text{loc}}$ et $H_{\Phi, x_0}^{\text{loc}}$. Notre réduction de l'opérateur $\mathcal{P}$ en un point de branchement s'énonce alors ainsi. Soit $P_0 = \frac{1}{2}(xhD_x + hD_x x)$ le générateur des dilatations. On a:

Theorème 1 [KaRo]: Soit $\mathcal{P}(x, hD_x, \mu, h)$ comme ci-dessus satisfaisant les hypothèses (H.8) à (H.9). Alors il existe un symbole analytique classique $c(z, \mu, h)$ défini pour $(z, \mu) \in \mathcal{V}(0, 0)$ tel que $\mathcal{P}$ est microlocalement équivalent près de (x_0, ξ_0) à

$$\tilde{\mathcal{P}}(y, hD_y, \mu, h) = \begin{pmatrix} y & c(P_0, \mu, h) \\ c^*(P_0, \mu, h) & hD_y \end{pmatrix}$$

On a $c(z, \mu, h) = \gamma(\mu, h)g(z, \mu, h)$ où γ et g sont des symboles analytiques classiques d'ordre 0; g est elliptique en $(0, 0)$, et $\gamma(\mu, h) = \gamma_0(\mu) + \mathcal{O}(h)$, $\gamma_0(0) = 0$. Le symbole $c(z, \mu, h)$ a une partie principale réelle. De plus, sous l'hypothèse supplémentaire (H.10), $\gamma'_0(0) \neq 0$.

L'idée fondamentale (que nous tenons de J. Sjöstrand) est de ne pas diagonaliser $\mathcal{P}$ au moyen d'un opérateur unitaire, mais de le réduire comme une forme quadratique. Bien évidemment, l'opérateur $\mathcal{A}$ n'est plus unitaire et cette réduction n'est commode du point de vue de la théorie spectrale que si l'on ne s'intéresse qu'au noyau de $\mathcal{P}$. Microlocalement près de (x_0, ξ_0) , l'étude du noyau de $\tilde{\mathcal{P}}(y, hD_y, \mu, h)$ se réduit essentiellement à celui d'un opérateur scalaire $Q_\alpha = P_0 - \alpha(\mu, h) - i\frac{h}{2}$, où $\alpha(\mu, h)$ est un symbole analytique classique d'ordre 0 vérifiant l'équation: $\alpha(\mu, h) = |c(\alpha - i\frac{h}{2}, \mu, h)|^2$. En particulier, $\alpha(\mu, h) = \mathcal{O}(\mu^2) + \mathcal{O}(h)$. Ce paramètre va s'interpréter comme le paramètre d'effet tunnel.

2. LES REGLES DE QUANTIFICATION

On dit que $\mu \in \mathcal{V}(0)$ est une résonance de $\mathcal{P}$ ssi $\mathcal{P}(x, hD_x, \mu, h)$, après distorsion (cf. [Hu]) a un noyau non trivial comme opérateur non-borné sur $L^2(\mathbf{R}^+) \otimes \mathbf{C}^2$ avec condition de Dirichlet en $x = 0$. Notre premier résultat montre que les résonances de $\mathcal{P}$ près de 0 sont discrètes et solutions d'une condition de quantification à la Bohr-Sommerfeld. Comme dans le cas scalaire ([HeSj2], [Mä], [Sj2], [CdVPa], ...) on l'obtient en prolongeant les solutions microlocales près des points de branchement par des constructions WKB le long des bicharactéristiques simples de $\mathcal{P}$. Ces solutions sont déterminées ainsi à des facteurs phase près $e^{i\delta_j(\mu, h)/h}$, $j = 1, 2, 3$ que l'on peut interpréter comme des intégrales d'action le long des morceaux de bicharactéristiques numérotées par les points tournants, même si cette identification ne prendra tout son sens que dans le Théorème 3. Les $\delta_j(\mu, h)$ sont encore des symboles analytiques d'ordre 0, réels analytiques par rapport à μ . En résolvant un problème de Grušin on montre le:

Théorème 2: Supposons (H.1) jusqu'à (H.10). Alors pour $\mu_0 > 0$ et $c > 0$ assez petits, $C > 0$ assez grand, il existe une bijection b entre l'ensemble des résonances de $\mathcal{P}$ dans

$$W_h = \{\mu \in \mathbf{C} \mid |\mu| < \mu_0, 0 \leq -\operatorname{Im} \mu < c|\operatorname{Re} \mu|^2, \operatorname{dist}(\frac{\alpha}{h}; i\mathbf{N}) \geq C\}$$

et l'ensemble (discret) dans W_h des racines de l'équation :

$$e^{i(\delta_2+\delta_3)/h} + e^{-i\theta/h} - e^{-2\pi\alpha/h} (e^{i(\delta_1+\delta_2)/h} + e^{-i\theta/h}) = 0$$

telle que $b(\mu) - \mu = \mathcal{O}(e^{-1/C_h})$. Ici:

$$\theta(\mu, h) = 2\alpha \log h - 2h(\operatorname{Arg} c(\alpha - \frac{i}{2}, \mu, h) - \operatorname{Arg} \Gamma(\frac{i\alpha}{h}))$$

et Γ désigne la fonction d'Euler.

Notons que la limite $\mu \rightarrow 0$ est très singulière. En particulier, la condition $\operatorname{dist}(\frac{\alpha}{h}; i\mathbf{N}) \geq C$ est une condition indicielle que l'on rencontre dans les équations ou les systèmes de type Fuchs [BoLePa]. Toutefois notre problème ne rentre pas dans ce cadre.

D'autre part, il est en général difficile de préciser le rang du projecteur spectral associé aux résonances dans W_h , et en particulier de dire si ces résonances sont simples. Toutefois, le

projecteur de Dunford associé à un contour de rayon $\text{Const}.h$ et centré sur l'une des valeurs de μ données dans le Théorème est de rang ≤ 3 .

On veut à présent donner une interprétation géométrique au Théorème 2 en termes d'intégrales d'action. Pour cela nous devons comparer les solutions WKB au voisinage des points de branchement données par la forme normale du Théorème 1, avec celles que l'on obtiendrait en diagonalisant l'opérateur $\mathcal{P}$ (au moyen d'un opérateur unitaire,) tout au long des bicharactéristiques, y compris dans un voisinage complexe des croisements. Or, sous nos hypothèses, les valeurs propres du symbole principal de $\mathcal{P}$ sont distantes d'une quantité de l'ordre de μ . On sait d'autre part [Iv] que le calcul fonctionnel des opérateurs h-Pseudo-Différentiels matriciels s'étend à de "bonnes" classes de symboles tant que les valeurs propres de leur symbole sont séparées par une quantité $\geq h^\delta$, $0 < \delta < \frac{1}{2}$. On va donc restreindre l'étude de nos résonances à une fenêtre:

$$W_h^\delta = \{\mu \in \mathbf{C} \mid ch^\delta < |\mu| < \mu_0, 0 \leq -\text{Im } \mu < c|\text{Re } \mu|^2\}$$

Pour $\mu \in W_h^\delta$, soient $\tilde{\lambda}^I(x, \xi, \mu, h) = \lambda_0^I(x, \xi, \mu) + \mathcal{O}(h)$ et $\tilde{\lambda}^{II}(x, \xi, \mu, h) = \lambda_0^{II}(x, \xi, \mu) + \mathcal{O}(h)$ les symboles de Weyl complets mod $\mathcal{O}(h^2)$ de l'opérateur $\mathcal{P}$ diagonalisé (au sens de [Iv]) pour μ réel. Même si les bases de vecteurs propres ne sont définies qu'à une transformation unitaire près, il n'y a pas d'ambiguïté pour définir les quantités $\tilde{\lambda}^I(x, \xi, \mu, h)$ et $\tilde{\lambda}^{II}(x, \xi, \mu, h)$. Soient aussi $\xi^I(x, \mu, h)$ et $\xi^{II}(x, \mu, h)$ les racines de

$$\tilde{\lambda}^I(x, \xi, \mu, h) = 0, \quad \tilde{\lambda}^{II}(x, \xi, \mu, h) = 0$$

et $x_+^a(\mu, h)$ la projection sur l'espace des x de l'un des 2 points de branchement complexes de la variété caractéristique près de a (en fait de la variété caractéristique "précisée" en tenant compte des termes en h .) Ces points sont l'intersection des 2 variétés lagrangiennes associées aux solutions sortante et entrante près du point de branchement. On obtient alors:

$$\begin{aligned} \delta_2(\mu, h) + \delta_3(\mu, h) &= C_{3,2}(\mu, h) + \alpha \log \frac{\alpha}{e} - h \text{Arg } c\left(\alpha - i\frac{h}{2}, \mu, h\right) + \mathcal{O}(h^2) \\ \delta_1(\mu, h) + \delta_2(\mu, h) &= C_{1,2}(\mu, h) + \alpha \log \frac{\alpha}{e} - h \text{Arg } c\left(\alpha - i\frac{h}{2}, \mu, h\right) - \frac{h^2}{\alpha} \rho\left(-i\frac{\alpha}{h}\right) + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

Ici ρ est une fonction qui donne l'asymptotique de la fonction d'Euler, et

$$\begin{aligned} C_{1,2} &= \int_{\mathbf{1}(\mu, h)}^{x_+^a(\mu, h)} \xi^{II}(s, \mu, h) ds + \int_{x_+^a(\mu, h)}^{\mathbf{2}(\mu, h)} \xi^I(s, \mu, h) ds + i\pi\alpha + \mathcal{O}(h^2) \\ C_{3,2} &= \int_{\mathbf{3}(\mu, h)}^{\mathbf{2}(\mu, h)} \xi^I(s, \mu, h) ds \end{aligned}$$

peuvent s'interpréter comme les aires des boucles sur la variété caractéristique, ou de leur prolongement analytique. Le terme $\pi\alpha$ s'interprète quant-à-lui comme l'action complexe (ou instanton) entre les points de branchement près de a (ou près de b , à cause de la symétrie,) justifiant ainsi le label "paramètre d'effet tunnel". Dans ces conditions on peut reformuler le Théorème 2 de la manière suivante.

Théorème 3 : Supposons (H.1) jusqu'à (H.11), et soit $0 < \delta < \frac{1}{2}$. Alors pour $\mu_0 > 0$ et $c > 0$ assez petits, il existe une bijection b' entre l'ensemble des résonances de $\mathcal{P}$ dans

$$W_h^\delta = \{\mu \in \mathbf{C} \mid ch^\delta < |\mu| < \mu_0, 0 \leq -\operatorname{Im} \mu < c |\operatorname{Re} \mu|^2\}$$

et l'ensemble (discret) dans W_h^δ des racines de l'équation :

$$(2) \quad \int_{\mathbf{3}(\mu, h)}^{2(\mu, h)} \xi^I(s, \mu, h) ds - \alpha \log \frac{\alpha}{e} + h \operatorname{Arg} c \left(\alpha - i \frac{h}{2}, \mu, h \right) + 2 \frac{h^2}{\alpha} \rho \left(i \frac{\alpha}{h} \right) \\ = \left(2k + \frac{1}{2} \right) \pi h + h^2 d(\mu, h), \quad k \in \mathbf{Z}$$

($d(\mu, h)$ est un symbole analytique classique d'ordre 0,) telle que $b'(\mu) - \mu = \mathcal{O}(e^{-2\pi\alpha/h})$.

Cette expression ressemble bien évidemment à la règle usuelle de quantification pour un puits de potentiel, (voir par exemple [GrSj], exercice 12.3) avec potentiel effectif $\tilde{\lambda}^I$; le terme singulier $\alpha \log \frac{\alpha}{e}$ tient compte du fait que ce puits a une singularité pour $\mu \rightarrow 0$. On a une situation analogue pour la quantification des valeurs propres près d'un sommet de barrière ([CdVPa], [Sj2]...) En particulier, quand $|\mu| > \mu_1 > 0$, les parties réelles des résonances sont à peu près équidistribuées sur l'intervalle $[\mu_1, \mu_0]$, avec des gaps d'ordre h . On va préciser la distribution de ces résonances dans la fenêtre W_h^δ .

Théorème 4 : Dans les conditions du Théorème 3, l'intervalle entre les parties réelles de deux résonances voisines dans W_h^δ vérifie : $\Delta\mu = \mathcal{O}(\frac{h^{1/2}}{|\log h|^{1/2}})$ uniformément pour $h > 0$ assez petit et $\mu \in W_h^\delta$.

Notons que contrairement à la situation décrite dans [CdVPa], il ne semble pas possible, avec les techniques utilisées ici, d'obtenir une asymptotique de Weyl du nombre de résonances dans W_h^δ .

3. LARGEUR DES RESONANCES

On va donner dans cette section une asymptotique exponentielle (au premier ordre,) de la largeur des résonances dans W_h^δ . Notons $\hat{\mathcal{O}}(e^{-2\pi\alpha/h})$ une quantité $e^{-2\pi\alpha(1+o(\mu))/h} \mathcal{O}(1)$, $\mu \rightarrow 0$.

Théorème 5 : Sous les hypothèses du Théorème 3, supposons que μ soit une racine simple de (2); plus précisément si $C(\mu, h) = (\partial_\mu(2\alpha \log \frac{\alpha}{e} - \delta_2 - \delta_3))^2$ vérifie: $\frac{h}{C(\mu, h)} = o(1)$, $h \rightarrow 0$, alors la largeur de la résonance μ est donnée par :

$$(3) \quad -\operatorname{Im} \mu = 2h(C(\mu, h) + \mathcal{O}(h))^{-1} \left[-\cos((\delta_2 + \delta_3)/h) \cos((\delta_2 + \delta_1)/h) \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\pi\alpha h} + \hat{\mathcal{O}}(e^{-2\pi\alpha/h})$$

Bien que l'on n'ait pas formellement établi ce fait, il est à peu près clair que nos méthodes permettent d'obtenir une asymptotique exponentielle (ou développement multi-instantons. cf. [Be2], [DeDi], ...) à l'ordre $\hat{\mathcal{O}}(e^{-N\pi\alpha h})$, tant que $N\alpha$ reste assez petit, mais indépendant de h .

Il n'est pas possible de donner ici une idée des preuves de nos théorèmes; celles-ci utilisent essentiellement les techniques d'analyse microlocale développées dans [HeSj2], [Sj2] et [Mä]; nous renvoyons à [Ro] pour les détails, où l'on généralise aussi ces résultats à des croisements de codimension 3.

REFERENCES

- [Ba] **H. Baklouti** Asymptotique des largeurs de résonances pour un modèle d'effet tunnel microlocal microlocal. Thèse U. Paris Nord, 1995
- [Be] **M. V. Berry 1.** Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. Proc. R. Soc. London A 1984. p. 45-57. (reprinted in [ShWi]) **2.** Asymptotics, Supersymptotics, Hypermultiplicities, *in*: Asymptotics beyond all orders. Segur, *ed.* Plenum Press N.Y. 1991.
- [CdVPa] **Y. Colin de Verdière B. Parisse 1.** Equilibre instable en régime semi-classique I. Concentration microlocale. Comm. Part. Diff.Eq. 252, 1993. **2.** Equilibre instable en régime semi-classique II. Conditions de Bohr Sommerfeld. Ann. Inst. H. Poincaré. Phys. Théorique. 61(3) 1994. p.347-367
- [CoDuSe] **J.M. Combes P. Duclos R.Seiler** The Born-Oppenheimer approximation, *in*: Rigorous atomic and Molecular Physics, Velo and Wightman, *eds.* Plenum Press, 1981, p.185-212.
- [DeDi] **E. Delabaere H. Dillinger** Contribution à la résurgence quantique. Thèse. U. Nice, 1991
- [DuMe] **P. Duclos B. Meller** A simple model for predissociation, *in* : Operator Theory: Advances and Applications. Vol. 70, Birkhäuser.
- [Gr] **A. Grigis** Résonances par correspondance. Séminaire EdP, Ecole Polytechnique. 1994-95 Exposé no 23
- [GrSj] **A. Grigis J. Sjöstrand** Microlocal Analysis for Differential Operators. Cambridge University Press 1994.
- [Ha] **G. Hagedorn** Molecular propagation through electron energy level crossings. Memoirs A.M.S. 536, 111, 1994
- [HaJo] **G. Hagedorn A. Joye** Landau-Zener transitions through small electronic eigenvalue gaps in the Born-Oppenheimer approximation. Preprint CPT-95/P. 3215, 1995.
- [HeSj] **B. Helffer J. Sjöstrand 1.** Résonances en limite semi-classique. Bull. Soc. Math. France 114(3) 1986. Mémoire no 24/25. **2.** Semiclassical analysis for Harper equation III. Cantor structure of the spectrum. Bull. Soc. Math. France 117(4) 1989. Mémoire no 39.
- [HeMa] **B. Helffer A. Martinez** Comparaison entre les diverses notions de résonances. Helv. Phys. Acta 60, 1987 p.992-1008
- [Hu] **W. Hunziker** Distorsion analyticity and molecular resonances curves. Ann. I. H. P. Phys. Th. 45(3), 1986 p.485-494
- [Iv] **V. Ivrii** Semiclassical Microlocal Analysis and Precise Spectral Asymptotics. Preprint Ecole Polytechnique, 1990, disponible aussi par:
<ftp://www.scar.toronto.edu/pub/math.preprints/ivrii/Book>.
- [JaSe] **V. Jakšić J. Segert** Exponential approach to the adiabatic limit and the Landau-Zener formula. Preprint Caltech, 1994.
- [Jo] **A. Joye** Proof of the Landau-Zener formula. Asympt. Anal. 9(3), 1994 p.202-259
- [KaRo] **N. Kaïdi M. Rouleux** Forme normale d'un hamiltonien à 2 niveaux près d'un point de branchement (limite semi-classique.) C.R. Acad. Sci. Paris I 117 1993. p.359-364
- [KlMaWa] **M. Klein A. Martinez X.P. Wang** On the Born-Oppenheimer approximation of wave operators in molecular scattering theory. Comm. Math. Physics, 152, 1993, p.73-95

- [KlMaSeWa] **M. Klein A. Martinez R. Seiler X.P. Wang** On the Born-Oppenheimer expansion for polyatomic molecules, *Comm. Math. Physics*, 143, 1992, p.606-639
- [Ko] **J. Korsch** Semiclassical description of resonances, *in : Resonances*, Brändas Elander, eds, *Lect. Notes Phys.* 325, Springer, 1989 p.253-280
- [LaLi] **L. Landau E. Lifchitz** *Physique Théorique. Mécanique Quantique*, Mir, 1967.
- [Ma] **A. Martinez 1.** Résonances dans l'approximation de Born-Oppenheimer. *J.of Diff. Eq.* 91, 1991, p.517-530. **2.** Estimates on complex interactions in phase space. *Math. Nachr.* 167, 1994 p.203-257
- [MaMes] **A. Martinez B. Messirdi** Resonances of diatomic molecules in the Born- Oppenheimer approximation. *Comm. Part. Diff. Eq.* 19 (7 et 8), 1994, p.1139-1162
- [Mä] **Ch. März** Spectral asymptotics for Hill's equation near the potential maximum. *Asymptotic Anal.* 5 1992, p.221-267
- [Me] **B. Meller** Thèse U. Toulon, 1995
- [MöKo] **R. Möhlenkamp J. Korsch** Semi-classical complex energy quantization for coupled equations : Feshbach resonances and predissociation. *Phys. Rev. A* 34(6), 1986 p.4717-4721
- [Na] **S. Nakamura** On an example of phase-space tunneling. *Ann. I.H. P. Phys. Th.* 63(2), 1995, p.211-229
- [N] **L. Nedelec** Résonances semi-classiques pour l'opérateur de Schrödinger matriciel en dimension 2. *Ann. I.H P. Phys. Th.* 1995
- [Ra] **A. Raphaelian** Ion-atom scattering within a Born-Oppenheimer framework. Dissertation T.U. Berlin, 1986.
- [Ro] **M. Rouleux** Feshbach resonances in the semi-classical limit. Preprint CPT/P.3230, 1995
- [ShWi] **A. Shapere F. Wilczek** *Geometric Phases in Physics*. World Scientific, Vol 5, 1989
- [Sj] **J. Sjöstrand 1.** Singularités analytiques microlocales. *Astérisque* 95 1982. **2.** Density of states oscillations for Magnetic Schrödinger operators. In: Bennewitz (ed.) *Differential Equations and Mathematical Physics 1990*. Univ. of Alabama, Birmingham. p.295-345 **3.** Function spaces associated to global I-lagrangian manifolds. Preprint Ecole Polytechnique no 1111, 1995.
- [So] **V. Sordoni** Born-Oppenheimer expansion for excited states of diatomic molecules. *C. R. Acad. Sc. Paris I*, 320, 1994 p.1091-1096

Michel Rouleux,
 Centre de Physique *Théorique*
 CNRS Luminy Case 907
 13288 Marseille Cedex 9

et PHYMAT, Université de Toulon et du Var.