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

B. HELFFER
J. SJÖSTRAND

Puits multiples en limite semi-classique. II. Interaction moléculaire. Symétries. Perturbation

Annales de l'I. H. P., section A, tome 42, nº 2 (1985), p. 127-212
<http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1985__42_2_127_0>

Ann. Inst. Henri Poincaré,
Vol. 42, n° 2, 1985, p. 127-212. *Physique théorique*

Puits multiples en limite semi-classique II. Interaction moléculaire. Symétries. Perturbation

par

B. HELFFER et **J. SJÖSTRAND**

Université de Nantes,
Institut de Mathématiques et Informatique,
2, Chemin de la Houssinière, 44072 Nantes

Université de Paris-Sud,
Centre d'Orsay, Mathématique,
Bâtiment 425, 91405 Orsay Cedex

RÉSUMÉ. — Nous poursuivons l'étude de [*11*] du « splitting » des valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger semi-classique : $P = -h^2\Delta + V - E_0$ ($h \to 0$) dans le cas de plusieurs puits de potentiel. L'idée de base est la même que dans [*11*]. Pour chaque puits de potentiel on considère comme problème de référence, l'opérateur P avec condition de Dirichlet dans un grand domaine qui contient le puits donné mais pas les autres. Pour un intervalle d'énergie donné : $I(h) = [E_0 + o(1), E_0 + o(1)]$, vérifiant des hypothèses convenables, soit F l'espace de dimension finie, associé aux valeurs propres de P dans I(h). La matrice de $P|_F$ par rapport à une base convenable peut alors être décrite modulo une erreur exponentiellement petite à l'aide de valeurs propres et de fonctions propres des problèmes de référence. En conséquence, les valeurs propres de P dans I(h) sont données par des valeurs propres des problèmes de référence avec certaines corrections exponentiellement petites, dues à l'interaction entre les puits. Par rapport au théorème analogue de [*11*], nous améliorons ici l'estimation de l'erreur de façon à pouvoir traiter aussi des cas d'interaction « moléculaire ». Nous étudions également le cas où V est invariant par un groupe fini d'isométries, ainsi que l'effet des petites perturbations de V. On donne plusieurs exemples et applications, souvent inspirés par des travaux antérieurs de E. M. Harrell, B. Simon, G. Jona-Lasinio, F. Martinelli, E. Scoppola et d'autres. Certains de nos exemples se traitent uniquement à l'aide des résultats de [*11*].

ABSTRACT. — We continue the study of [*11*] of the « splitting » of the eigenvalues of a semi-classical Schrödinger operator: $P = -h^2\Delta + V(x) - E_0$,

($h \to 0$) in the case of several potential wells. The basic idea of the method is the same as in [11]: For each potential well, we consider as a reference problem, the operator P with Dirichlet boundary conditions in a large domain which contains the given well, but not the others. For a given energy interval $\mathrm{I}(h) = [\mathrm{E}_0 + o(1), \mathrm{E}_0 + o(1)]$ with suitable properties, we let F be the finite dimensional space corresponding to the eigenvalues of P in $\mathrm{I}(h)$. The matrix of $\mathrm{P}|_{\mathrm{F}}$ for a convenient basis, can then be described up to an exponentially small error in terms of eigenvalues and eigenfunctions of the reference problems. As a consequence, the eigenvalues of P in $\mathrm{I}(h)$ can be described by eigenvalues for the reference problems with certain exponentially small corrections due to the interaction between the wells. A theorem of this type was given in [11], but here we improve the remainder estimates in such a way that also the case of « molecular interaction » can be treated. We also study the case when V is invariant under a finite group of isometries, as well as the effect of small perturbations on the potential. Several examples and applications are given, often under the inspiration of earlier works by E. M. Harrell, B. Simon, G. Jona-Lasinio, F. Martinelli, E. Scoppola and others. Some of our examples are based only on the results of [11].

---

§.0. INTRODUCTION

Dans cet article, nous poursuivons l'étude, entreprise dans l'article I ([11]) des valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger (défini sur une variété C^∞ M) : $\mathrm{P}(h) = -h^2\Delta + \mathrm{V}$ situées dans un intervalle $\mathrm{I}(h)$ « tendant » lorsque $h \to 0$ vers une certaine énergie E_0 qu'on supposera nulle par la suite. L'étude des effets tunnels a une longue histoire et nous renvoyons à notre précédent article [11] et surtout à [20] pour une bibliographie complète.

Rappelons très rapidement, pour fixer les idées, la démarche suivie dans [11] et que nous préciserons au § 2 et plaçons-nous, pour simplifier, dans le cas où M est compacte.

On suppose que : $\mathscr{P} = \mathrm{V}^{-1}(]-\infty, 0])$ est une réunion finie disjointe de puits connexes U_j ($j = 1, \ldots, \mathrm{N}$) et on munit M de la distance d dégénérée associée à la métrique d'Agmon $\max(\mathrm{V}, 0)dx^2$ où dx^2 désigne la métrique riemannienne sur M. On associe à chaque puits U_j (et pour tout $\eta > 0$, η assez petit) un ouvert M_j^η défini par :

$$\mathrm{M}_j^\eta = \mathrm{M} \backslash \bigcup_{k \neq j} \mathrm{B}(\mathrm{U}_k, \eta)$$

(où $\mathrm{B}(\mathrm{U}_k, \eta)$ est la boule pour d de centre U_k et de rayon η).

Considérant la réalisation de Dirichlet $P^{\eta}_{M_j}(h)$ définie pour $P(h)$ dans l'ouvert M^{η}_j, on cherche d'abord à étudier dans quelle mesure, si on désigne par :

$$\left\{\begin{array}{l} D_j \text{ l'espace propre engendré par les fonctions propres} \\ \varphi_{j,l} \text{ de } P^{\eta}_{M_j}(h) \text{ correspondant aux valeurs propres} \\ \mu_{j,l} \text{ situées dans } I(h) \end{array}\right.$$

l'opérateur $\oplus P_{M_j}(h)$ opérant sur $\bigoplus_j D_j$ approche « bien » l'opérateur $P(h)$ restreint à l'espace F engendré par les fonctions propres correspondant aux valeurs propres $\lambda_k(h)$ situées dans $I(h)$.

Sous des hypothèses naturelles sur $I(h)$ (les valeurs propres $\mu_{j,l} \in I(h)$ sont bien isolées du reste du spectre D_h de P_{M_j}), on montre que, pour h assez petit, les 2 espaces $\oplus D_j$ et F ont même dimension et que, pour tout $\varepsilon > 0$, on peut choisir $\eta_0 > 0$ t. q., $\forall \eta < \eta_0$, il existe une bijection b du spectre de $\oplus P_{M_j} |_{\underset{j}{\oplus} D_j}$ sur le spectre de $P|_F$ t. q.

$$b(\lambda) - \lambda = \mathcal{O}_\varepsilon\left(e^{-\frac{S_0}{h}+\frac{\varepsilon}{h}}\right)$$

où
$$S_0 = \inf_{l \neq m} d(U_l, U_m).$$

Ce résultat, dont des variantes dans le cas du double puits apparaissent dans [*18*] [*2*] et d'autres auteurs cités dans [*20*], est trop grossier pour analyser les interactions qui sont justement de l'ordre de l'erreur.

Notre objectif est donc maintenant de construire à partir d'une base orthonormale naturelle de $\oplus D_j$ définie par les $\varphi_{j,l}$ une base orthonormale de F dans laquelle $P|_F$ s'exprimera de manière agréable.

On procède ainsi ; si θ^{η}_j est une fonction C^∞ à support dans $B(U_j, 2\eta)$ et égale à 1 sur $\overline{B(U_j, \eta)}$, alors si $\psi^{\eta}_{j,l} = \chi^{\eta}_j \cdot \varphi^{\eta}_{j,l}$, $\chi^{\eta}_j = 1 - \sum_{k \neq j} \theta^{\eta}_k$ on pose $v^{\eta}_{j,l} = \Pi_F \psi^{\eta}_{j,l}$ (où Π_F désigne la projection orthogonale sur F)

et
$$\vec{e}^{\,\eta}_{j,l} = \vec{v} \,.\, [V]^{-1/2} \qquad \text{où} \qquad V = ((v_\alpha \mid v_\beta))$$

avec $\alpha = (j, l)$, $\beta = (\tilde{j}, \tilde{l})$.

Le théorème principal du §.2 est le suivant :

THÉORÈME 2.1.2. — *Sous les hypothèses précédentes, la matrice de* $P(h)|_F$ *dans la base* e_α *est donnée par* :

$$A = \operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \frac{1}{2}(\omega_{\alpha,\beta} + \omega_{\beta,\alpha}) + r_{\alpha,\beta} = \Delta + \hat{W} + R$$

où
$$\omega_{\alpha,\beta} = h^2 \int \chi_{j(\alpha)}(\varphi_\beta \nabla \varphi_\alpha - \varphi_\alpha \nabla \varphi_\beta) \nabla \chi_{j(\beta)} dx\,.$$

$r_{\alpha,\beta}$ est à un facteur $\mathcal{O}_\varepsilon(e^{\varepsilon(\eta)/h})$ près (avec $\varepsilon(\eta) \to 0$ si $\eta \to 0$) de l'ordre du coefficient $(j(\alpha), j(\beta))$ de la matrice $(\mathscr{D}'^2 + \mathscr{D}'^3)$ ou $\mathscr{D}'$ est défini par :

$$\mathscr{D}'_{l,m} = ((1 - \delta_{l,m})e^{-\frac{d(U_l,U_m)}{h}}).$$

Ce résultat améliore sensiblement le théorème (2.10) de notre premier article [*11*] et donne des informations précises sur la localisation des différentes fonctions propres de P. Dans [*11*], nous n'obtenions que :

$$r_{\alpha,\beta} = \mathcal{O}_\varepsilon(e^{\varepsilon/h - 2S_0/h}).$$

Des motivations pour ces améliorations apparaîtront clairement dans les exemples traités au § 4.2, 7.3 et 7.4. Disons simplement ici que, si l'on suppose que les puits se répartissent en paquets (qu'on appellera molécules), on peut s'intéresser à l'interaction moléculaire entre molécules distantes de plus de 2 S_0. Le reste obtenu dans [*11*] nous interdisait l'analyse d'écarts de cet ordre.

Le § . 1 est consacré aux résultats de Harrell [*6*] [*7*] concernant le double puits en dimension 1. Nous montrons comment retrouver ses résultats (formule explicite pour le terme dominant du décalage) par nos techniques, en évitant l'utilisation des théorèmes de comparaison d'équations différentielles. En particulier, on obtient que l'écart entre 2 valeurs propres exponentiellement proches situées en fond de puits, multiplié par $e^{S_0/h}$ est un symbole formel en puissance de h dont on peut expliciter le terme principal.

Le § . 3 est consacré à l'analyse de la structure des matrices A, Δ, $\hat{W}$, R quand on fait des hypothèses de symétrie. Sur la partie relative à la théorie des représentations des groupes finis (cf. par exemple [*17*]), nous avons été bien entendu inspirés par les ouvrages de Chimie où de nombreux exemples sont traités. D'autres exemples sont traités dans [*15*] et [*20*]. Toutefois, nous n'avons pas connaissance d'une présentation générale équivalente à la nôtre. De toute manière, le problème du contrôle du reste est escamoté chez les chimistes et notre étude était donc nécessaire.

Le § . 4 est consacré à l'étude de deux types d'exemples. Le premier précise des résultats esquissés dans [*20*], la matrice d'interaction qui apparaît est bien connue des chimistes puisqu'elle apparaît dans l'étude par la méthode L. C. A. O. des dérivées du Carbone. Dans le second exemple nous étudions un modèle théorique de 4 molécules à 3 atomes réparties au sommet d'un tétraèdre régulier avec le maximum de symétries et nous mettons en évidence des phénomènes d'interaction moléculaire.

Le § . 5 est consacré à l'étude de la matrice $\Delta = \mathrm{diag}(\mu_\alpha)$. Dans les situations symétriques, il est fréquent que :

$$\Delta = \mu \, . \, \mathrm{I}d$$

et on peut dans ce cas oublier cette matrice si on veut mesurer les écarts entre valeurs propres. La difficulté est que la précision avec laquelle on mesure les μ_α est beaucoup trop faible par rapport aux écarts que l'on veut mesurer. On ne connaît en effet en général que les développements asymptotiques en puissance de $h^{1/2}$ des μ_α et le problème de l'interaction devient intéressant lorsque tous les μ_α ont un même développement. On peut d'ailleurs toujours se ramener à ce cas.

Un moyen cependant d'avoir des exemples intéressants est de perturber à partir d'une situation symétrique. Compte tenu de la méthode que nous avons suivie, on étudie d'abord un problème de Dirichlet pour lequel on regarde les effets d'une perturbation du type $t\Delta V$ sur les valeurs propres. t est ici un paramètre qu'on peut faire varier dans un intervalle $]-e^{-\varepsilon_0/h}, e^{-\varepsilon_0/h}[$ ou bien fixer > 0 (et dans ce cas, on regarde une perturbation positive loin du fond du puits).

On est ici très près de la théorie classique des perturbations telle qu'elle est présentée dans les ouvrages de Kato ou de Reed-Simon, mais de nouvelles difficultés apparaissent liées à un contrôle précis des erreurs simultanément par rapport à t et h.

Si $\Delta V \geqslant 0$, $t \geqslant 0$, on sait d'après le principe du mini-max que les valeurs propres montent, mais on est intéressé par une estimation précise (majoration et minoration) de leur variation. La théorie développée dans [*11*] nous donne, grâce à notre bonne connaissance des fonctions propres du problème de Dirichlet, une réponse satisfaisante dans un cadre général (nous ne sommes pas limités au niveau fondamental).

Le §.6 est consacré à l'application des §.3, 4 et 5. Notre source d'inspiration a été principalement l'article de Jona-Lassinio, Martinelli et Scoppola [*13*] qui étudient le cas de la dimension 1 avec des méthodes probabilistes. Nous montrons ici qu'une étude analogue est possible dans le cas de la dimension > 1 et notre méthode permet de déterminer où sont localisées les fonctions propres correspondantes. Des résultats partiels dans cette direction apparaissent également dans [*2*] et [*20*].

Le §.7 est également inspiré par [*13*], mais nous utilisons les résultats de Harrell rappelés au §.1 pour l'estimation des coefficients de la matrice d'interaction. Notre meilleur contrôle des restes nous permet d'obtenir des résultats beaucoup plus précis. Nous mettons en évidence par exemple aux §.7.4 et 7.5 des phénomènes de double puits entre deux puits éloignés sur le cercle S^1 dans le cas où les puits intermédiaires résonnent faiblement. Nous reviendrons sur ce problème dans un troisième article [*12*].

L'appendice est consacré à un lemme de perturbation fin, peut-être classique, mais pour lequel nous n'avons pas de références.

Nous tenons à remercier A. Grigis et P. Duclos pour d'utiles conversations sur le sujet et A. Voros qui nous a signalé l'article [*13*].

§.1. RÉSULTATS DE HARRELL (cas $n = 1$)

Comme première application de [*12*], nous présentons dans ce paragraphe une autre démonstration des résultats de Harrell [*6*], et redémontrons quelques remarques d'autres articles [*5*] [*14*]. On évite ici les calculs délicats de Harrell utilisant des théorèmes de comparaison pour les équations différentielles *ordinaires* en les remplaçant par des résultats du §.5 de l'article [*11*] qui ont l'avantage d'avoir un cadre d'application qui n'est pas limité à la dimension 1.

Rappelons brièvement les hypothèses dans lesquelles nous travaillerons. On regarde l'équation de Schrödinger :

$$\text{(1.1)} \qquad P(h) = -h^2 \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad \text{sur} \quad \mathbb{R}$$

avec les hypothèses suivantes :

$$\text{(1.2)} \quad V \in C^\infty(\mathbb{R}),\ V(x) \geqslant 0\,; \quad V(x) = V(-x)\,; \quad V(x) = 0 \Leftrightarrow x = \pm a$$

(avec $a > 0$); $V''(a) \neq 0$; $\exists \varepsilon > 0$, t. q. $V^{-1}([-\infty, \varepsilon])$ soit compact;
On sait qu'alors, l'opérateur $P(h)$, admet pour h assez petit, une suite croissante de valeurs propres $\lambda_p(h)$ ($p \in \mathbb{N}$) avec les propriétés suivantes (cf. [*16*] [*11*] [*9*] [*10*])

$$\text{(1.3)} \quad \left\{ \begin{array}{ll} (1) & \lambda_{2k}(h) \approx \lambda_{2k+1}(h) \approx \sqrt{\dfrac{V''(a)}{2}}\,[2k+1]h \quad (\text{mod}\ \mathcal{O}(h^2)) \\ (2) & \lambda_{2k+1} - \lambda_{2k} \approx \mathcal{O}_k(h^\infty) \\ (3) & \lambda_p(h) \text{ correspond à une fonction propre paire (resp. impaire)} \\ & \quad \text{si } p \text{ est pair (resp. impair).} \end{array} \right.$$

L'objet de [*11*] était d'affiner 1.3.2. On va, à titre d'exemple, suivre plus explicitement les constructions de cet article dans le cas : $n = 1$. La distance d'Agmon introduite dans ([*1*] [*11*] [*19*] [*20*]) prend la forme :

$$\text{pour} \quad x > \pm a, \qquad d(x, \pm a) = \int_{\pm a}^{x} \sqrt{V(t)}\,dt\,.$$

$$\text{pour} \quad x < \pm a, \qquad d(x, \pm a) = \int_{x}^{\pm a} \sqrt{V(t)}\,dt\,.$$

En particulier, la distance entre les deux puits est donnée par :

$$\text{(1.4)} \qquad S_0 = \int_{-a}^{+a} \sqrt{V(t)}\,dt\,.$$

Notre méthode consistait à associer à chaque puits $\pm a$ un problème de Dirichlet et le problème spectral associé :

$$(1.5)\qquad \begin{cases} \left(-h^2\dfrac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\varphi_\pm=\mu_\pm\varphi_\pm \\ \varphi_\pm(\mp a\pm\eta)=0 \\ \varphi_\pm(\pm M)=0 \end{cases}$$

avec $M>0$ assez grand pour que $\int_{-M}^{-a}\sqrt{V(t)}dt>2S_0$ et η arbitrairement petit.

Les résultats de [*11*] (§.5) montrent que (1.3.2) peut être renforcé sous la forme :

$$(1.6)\quad \lambda_{2k+1}(h)-\lambda_{2k}(h)\equiv 2h^2\left[\varphi_k^-(h)\frac{\partial}{\partial x}\varphi_k^+(h)-\varphi_k^+(h)\frac{\partial\varphi_k^-}{\partial x}(h)\right]_{(0)}$$
$$(\text{modulo } \mathcal{O}_k(h^\infty\,.\,e^{-S_0/h}))$$

où $\varphi_k^\pm(h)(x)=\varphi_k^\mp(h)(-x)$ est la solution du problème $(1.5)_\mp$ pour la valeur propre $\mu_k(h)$ localisée près de $\sqrt{\dfrac{V''(a)}{2}}(2k+1)h$ (modulo $\mathcal{O}(h^2)$).

Réutilisant les propriétés de symétries, on obtient :

$$(1.7)\qquad \lambda_{2k+1}(h)-\lambda_{2k}(h)\equiv -4h^2\left[\varphi_k^-(h)(0)\,.\,\frac{\partial\varphi_k^-}{\partial x}(h)(0)\right]$$
$$(\text{modulo } \mathcal{O}_k(h^\infty)e^{-S_0/h}).$$

Le problème est maintenant de déterminer avec suffisamment de précision $\varphi_k^-(h)(0)$ et $\dfrac{\partial\varphi_k^-}{\partial x}(h)(0)$.

Le théorème (5.9) de [*11*] montre, pour tout $k\in\mathbb{N}$, l'existence de m_k et d'une série formelle en h :

$$\alpha^k(h)=(\alpha_0^k+\alpha_1^kh+\ldots+\alpha_p^kh^p+\ldots)$$

tels que :

$$(1.8)\qquad \lambda_{2k+1}(h)-\lambda_{2k}(h)\equiv h^{m_k}\,.\,e^{-S_0/h}[\alpha^k(h)]$$
$$(\text{mod } \mathcal{O}_k(h^\infty)e^{-S_0/h}).$$

Il s'agit donc de calculer explicitement α_0^k et m_k et de comparer avec la formule de Harrell [*6*]

$$(1.9)\quad \lambda_{2k+1}(h)-\lambda_{2k}(h)=h\sqrt{\frac{V''(a)}{2}}\left[\frac{\Pi^{-1/2}}{k\,!}\left(\frac{2k+1}{e}\right)^{\frac{2k+1}{2}}2^{1-k}+0(h)\right]$$
$$\times\, e^{-\frac{1}{h}\int_{t_k^-(h)}^{t_k^+(h)}\sqrt{V-\mu_k(h)}dt}$$

L'expression $\int_{t_k^-(h)}^{t_k^+(h)} \sqrt{V - \mu_k(h)}$ où $t_k^-(h)$ et $t_k^+(h)$ sont les solutions dans $]-a, +a[$ de $V = \mu_k(h)$ n'est autre que la distance d'Agmon pour $\max(V - \mu_k(h), 0)dx^2$ entre les 2 composantes de $V^{-1}(]-\infty, \mu_k(h)])$. Cette distance rejouera un rôle dans [*12*].

Calculons donc, à partir de (1.7), les constantes α_0^k et m_k apparaissant dans (1.8). Désormais, on suppose que V est normalisé par :

$$V''(-a) = V''(a) = 2.$$

D'après la proposition (5.8) de [*11*], on sait que, pour $x \in [-a, a-2\eta]$, on a :

$$e^{\frac{1}{h}\int_{-a}^{x}\sqrt{V(t)}dt} \cdot \varphi_k^+(h, x) \equiv h^{-\nu_k}(\delta_0(x) + \delta_1(x)h + \dots) \tag{1.10}$$
$$(\text{modulo } \mathcal{O}(h^\infty))$$

où δ_0 est C^∞ et vérifie l'équation de transport:

$$2\sqrt{V} \cdot \frac{d}{dx}\delta_0 + [(V^{1/2})' - (2k+1)]\delta_0 = 0. \tag{1.11}$$

Cette équation est singulière en $-a$. On en déduit de (1.11) que, pour tout $c \in]-a, a-2\eta[$, on a :

$$\delta_0(x) = \delta_0(c)e^{-\int_c^x \left[\frac{(V^{1/2})' - (2k+1)}{2\sqrt{V}}\right](t)dt}. \tag{1.12}$$

Le problème est que (1.12) ne détermine $\delta_0(x)$ qu'à une constante près. La constante sera déterminée (à ± 1 près) en imposant que $\| \varphi_k^+(h, x) \| = 1$.

En examinant, le comportement de $\int_c^x \left[\frac{(V^{1/2})' - (2k+1)}{\sqrt{V}}\right]dt$ lorsque c tend vers $-a$, on est conduit à écrire $\delta_0(x)$ sous la forme :

$$\delta_0(x) = \gamma \cdot \lim_{\varepsilon \to 0} \varepsilon^k e^{-\int_{-a+\varepsilon}^x \left[\frac{(V^{1/2})' - (2k+1)}{\sqrt{V}}\right](t)dt}. \tag{1.13}$$

Notons alors que :

$$\delta_0(x) = \gamma[x+a]^k + \mathcal{O}(x+a)^{k+1}. \tag{1.14}$$

Une comparaison avec la $(k+1)^{\text{ième}}$ fonction propre normalisée de l'oscillateur harmonique $(-h^2\partial_x^2 + x^2)$ translaté en $-a$ (cf. [*11*], §.3), permet alors de montrer que :

$$\gamma = h^{-1/4} \cdot h^{-k/2} \cdot \Pi^{-1/4}\left(\frac{2^k}{k!}\right)^{1/2}. \tag{1.15}$$

On a donc finalement :

avec

$$(1.17) \qquad \delta_0(x) = \Pi^{-\frac{1}{4}}\left(\frac{2^k}{k\,!}\right)^{1/2} \lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon^k e^{-\int_{-a+\varepsilon}^{x}\left[\frac{(V^{1/2})'-(2k+1)}{2\sqrt{V}}\right]dt}.$$

Revenant à la formule (1.7), on a démontré la :

PROPOSITION 1.1. — *Sous les hypothèses de ce paragraphe, et normalisant par* $V''(a)=2$, *le décalage des valeurs propres est donné, lorsque* $h \to 0$, *par* :

$$(1.18) \qquad \lambda_{2k+1}(h) - \lambda_{2k}(h) = h^{1/2-k}.\frac{\Pi^{-1/2}}{k!}.2^{k+2}\sqrt{V'(0)}\times$$
$$\times \lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon^{2k} e^{-2\int_{-a+\varepsilon}^{0}\left[\frac{(V^{1/2})'-(2k+1)}{2\sqrt{V}}\right]dt} e^{-S_0/h}[1 + \mathcal{O}_k(h)].$$

REMARQUE 1.2. — Un calcul laborieux que nous ne reproduisons pas ici, permet de montrer l'identité entre (1.9) et (1.18). On a donc bien retrouvé le résultat de Harrell. Toutefois la formule (1.18) complétée par (1.8) est qualitativement plus satisfaisante.

REMARQUE 1.3. — Dans le livre de Landau-Lifchitz [*14*] (Chap. VII, p. 214), on obtient de manière très heuristique (mais en s'appuyant sur la méthode W. K. B. complexe), une formule du type (1.9) mais valable loin du fond du puits, disons pour $(2k + 1)h \geqslant \varepsilon_0 > 0$:

$$(1.19) \qquad \lambda_{2k+1}(h) - \lambda_{2k}(h) \approx \frac{h[\omega_k(h)]}{\Pi} e^{-\frac{1}{h}\int_{t_k^-(h)}^{t_k^+(h)} \sqrt{V-\mu_k(h)}dt}$$

(le signe $\approx$ étant peu précisé chez ces auteurs qui écrivent d'ailleurs égal) où $\omega_k(h) = \dfrac{2\Pi}{T_k(h)}$ est la fréquence du mouvement périodique dans l'un des puits d'énergie $\mu_k(h)$.

Précisons immédiatement que les champs de validités des formules (1.9) (ou 1.18) et (1.19), sont distincts mais notons que, si $V''(a) = 2$, on a :

$$(1.20) \qquad \omega_k(h) \to 2 \quad \text{lorsque} \quad \mu_k(h) \to 0$$

et en utilisant la formule de Stirling que :

$$(1.21) \quad B_k \overset{\text{def}}{\equiv} \frac{\Pi^{-1/2}}{k\,!}\left(\frac{2k+1}{e}\right)^{\frac{2k+1}{2}} 2^{1-k} \to \frac{2}{\Pi} \quad \text{lorsque} \quad k \to +\infty.$$

On en conclut l'inadéquation de la formule (1.19) pour le fond de puits puisque $B_0/(2\Pi) = (\Pi/e)^{1/2}$, mais que cette formule devient « meilleure » lorsque k tend vers l'∞, puisque

$$B_k/(2\Pi) \underset{k\to\infty}{\longrightarrow} 1$$

Ce type de remarque (purement heuristique !) apparaît pour $k = 0$ dans [5] et A. Voros nous a indiqué que ce phénomène lui était connu.

§.2. INTERACTION

2.1. Interaction atomique.

Dans ce paragraphe, on raffine les résultats du §.2 de [11] pour tenir compte des différences de distances éventuelles entre les différents puits. Notre objectif est de préciser l'ordre de grandeur des erreurs dans le calcul de la matrice d'interaction. On se place donc dans le même cadre et, par exemple, on va traiter le cas où M est une variété C^∞ compacte. On s'intéresse alors aux valeurs propres de : $-h^2\Delta + V(x)$ voisines de 0.

On suppose que : $\mathscr{P} = V^{-1}(]-\infty, 0])$ est une réunion finie de puits U_j ($j=1, \ldots, N$) et sur M, on considère la métrique d'Agmon max $(V, 0)dx^2$, où dx^2 désigne la métrique riemannienne sur M et on note $d(x, y)$ la distance dégénérée correspondante. On fera l'hypothèse de connexité suivante sur les U_j

(2.1.1) Le diamètre de U_j est nul.

Pour tout j ($j = 1, \ldots, N$), on introduit, pour $\eta > 0$:

$$B(U_j, \eta) = \{ x \in M, d(x, U_j) \leqslant \eta \}. \tag{2.1.2}$$

Dans nos applications, $B(U_j, \eta)$ est à bord régulier pour $\eta > 0$ assez petit et si ce n'était pas le cas, on pourrait toujours trouver un V_j^η « proche » avec cette propriété $\left(\text{par exemple compris entre } B(U_j, \eta) \text{ et } B\left(U_j, \frac{3}{2}\eta\right)\right)$.
Pour chaque atome U_j, on se pose un problème de Dirichlet dans :

$$M_j^\eta = M \setminus \bigcup_{k \neq j} B(U_k, \eta) \tag{2.1.3}$$

(si $\eta > 0$ est assez petit, les V_j^η sont disjoints)
et on note $P_{M_j^\eta}(h)$ la réalisation de Dirichlet de $-h^2\Delta + V$ dans M_j^η.

On se donne, comme dans [11] (points (2.4) et (2.5)), un intervalle :

$[\alpha(h), \beta(h)]$ $(h \in \mathscr{I} \subset]0, h_0])$ t. q. $\begin{matrix}\alpha(h) \to 0\\ \beta(h) \to 0\end{matrix}$ quand $h \to 0$ dans lequel on veut analyser le spectre de $P(h)$. On désigne par :

(2.1.4) $\left[\begin{array}{l}\mu^\eta_{j,1}(h), \ldots, \mu^\eta_{j,m_j}(h) \text{ les valeurs propres de } P_{M^\eta_j}(h) \text{ contenues}\\ \text{dans } I(h) \text{ et par } \varphi^\eta_{j,1}(h), \ldots, \varphi^\eta_{j,m_j}(h) \text{ un système orthonormal}\\ \text{associé.}\end{array}\right.$

On suppose que $I(h)$ entoure une partie isolée des différents spectres, c'est-à-dire :

(2.1.5) $\left[\begin{array}{l}\text{Il existe une fonction } a(h) > 0 \text{ t. q. } |\log a(h)| = o\left(\frac{1}{h}\right) (h \to 0)\\ \text{et t. q. P et } P_{M^\eta_j} \text{ n'ont pas de spectre dans}\\ \qquad [\alpha(h) - 2a(h), \alpha(h)[\cup]\beta(h), \beta(h) + 2a(h)].\end{array}\right.$

Soit maintenant θ^η_j une fonction C^∞ à support dans $B(U_j, 2\eta)$ et égale à 1 sur $B(U_j, \eta)$. On pose alors :

(2.1.6) $$\chi^\eta_j = 1 - \sum_{k \neq j} \theta^\eta_k ; \qquad \psi^\eta_{j,l} = \chi^\eta_j \cdot \varphi^\eta_{j,l} .$$

On écrira : $\alpha = (j, l)$ et $j(\alpha) = j$.

On rappelle (cf. [11], lemme 2.3) que :

(2.1.7) $$\varphi_\alpha, \psi_\alpha = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}d_{j(\alpha)}(x)}\right) \quad \text{où} \quad d_{j(\alpha)}(x) = d(x, U_{j(\alpha)})$$

$\tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}d_{j(\alpha)}(x)}\right)$ signifiant ici, que, pour tout $\varepsilon > 0$, on a :

$$\varphi_\alpha, \psi_\alpha = \mathcal{O}_\varepsilon\left(e^{-\frac{1}{h}d_{j(\alpha)}(x) + \frac{\varepsilon}{h}}\right)$$

et qu'on a les mêmes estimations pour les dérivées.

Remarquons maintenant que l'on a :

(2.1.8) $$P\psi_\alpha = \mu_\alpha \psi_\alpha + r_\alpha$$

où

(2.1.9) $$\text{Supp } r_\alpha \subset \bigcup_{j(\beta) \neq j(\alpha)} B(U_{j(\beta)}, 2\eta), \qquad r_\alpha = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}d_{j(\alpha)}(x)}\right)$$

Soit $F \subseteq L^2(M)$ l'espace associé à $\text{Sp}(P) \cap I(h)$ et Π_F le projecteur orthogonal sur F. On introduit :

(2.1.10) $$v_\alpha = \Pi_F \psi_\alpha$$

de manière à ce que $v_\alpha - \psi_\alpha \in F^\perp$.

Si E désigne l'espace vectoriel engendré par les ψ_α, on a obtenu dans [*11*] que :

$$\vec{d}(\mathrm{F}, \mathrm{E}) = \vec{d}(\mathrm{E}, \mathrm{F}) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\mathrm{S}_0/h}) \tag{2.1.11}$$

$\tilde{\mathcal{O}}$ signifiant que, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $\eta_0 > 0$ t. q. si $0 < \eta < \eta_0$ et E est l'espace vectoriel engendré par les ψ_α^η, on ait

$$\vec{d}(\mathrm{F}, \mathrm{E}) = \vec{d}(\mathrm{E}, \mathrm{F}) = \mathcal{O}(e^{-\mathrm{S}_0/h + \varepsilon/h}),$$

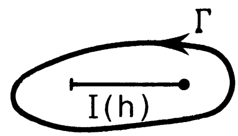
où :

$$\mathrm{S}_0 = \inf_{j \neq k} d(\mathrm{U}_j, \mathrm{U}_k) \tag{2.1.12}$$

et en particulier, pour h assez petit, les espaces ont la même dimension.

Rappelons maintenant que :

$$v_\alpha - \psi_\alpha = \oint_\Gamma (\mu_\alpha - z)^{-1}(\mathrm{P} - z)^{-1} r_\alpha dz \tag{2.1.13}$$



où $\Gamma(h)$ est un contour qui reste à distance convenable des différents spectres, par exemple : $\Gamma(h) = \{ z \in \mathbb{C}, d(z, \mathrm{I}(h)) = a(h) \}$ et qui ne contient en son intérieur que les valeurs propres contenues dans $\mathrm{I}(h)$. On déduit maintenant de (2.1.9) que :

$$\begin{aligned} r_\alpha(x) &= \tilde{\mathcal{O}}\Big(\sup_{y \in \mathrm{Supp}\, r_\alpha} e^{-\frac{1}{h}[d(x,y) + d(y, \mathrm{U}_{j(\alpha)})]} \Big) \\ &= \tilde{\mathcal{O}}\big(e^{-\frac{1}{h}\delta_{j(\alpha)}(x)}\big) \end{aligned} \tag{2.1.14}$$

où

$$\delta_j(x) = \inf_{j \neq k} d(x, \mathrm{U}_k) + d(\mathrm{U}_k, \mathrm{U}_j) \tag{2.1.15}$$

et on a des estimations semblables pour les dérivées.

On démontrera au §.2.2 le :

LEMME 2.1.1. — *Soit, pour* $z \in \Gamma(h)$, $v_\alpha^z = (\mathrm{P} - z)^{-1} r_\alpha$, *alors on a* :

$$v_\alpha^z = \tilde{\mathcal{O}}\big(e^{-\frac{1}{h}\delta_{j(\alpha)}(x)}\big) \tag{2.1.16}$$

et des estimations analogues pour les dérivées uniformément par rapport à z dans $\Gamma(h)$.

Revenant à la formule (2.1.13), on déduit du lemme (2.1.1) et du choix de $\Gamma(h)$ que :

(2.1.17) $\quad v_\alpha - \psi_\alpha = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\delta_{j(\alpha)}(x)/h})$ (ainsi que les dérivées)

d'où en particulier :

$$v_\alpha = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-d_{j(\alpha)}(x)/h}). \tag{2.1.18}$$

Utilisant l'orthogonalité entre $(v_\alpha - \psi_\alpha)$ et F, on obtient alors facilement :

$$\begin{aligned}(v_\alpha \mid v_\beta) - (\psi_\alpha \mid \psi_\beta) &= (v_\alpha \mid v_\beta - \psi_\beta) + (v_\alpha - \psi_\alpha \mid \psi_\beta) \\ &= -(v_\alpha - \psi_\alpha \mid v_\beta - \psi_\beta) \\ &= \tilde{\mathcal{O}}(1) \sup_x e^{-\frac{1}{h}(\delta_{j(\alpha)}(x) + \delta_{j(\beta)}(x))}\end{aligned}$$

d'où finalement :

$$(2.1.19) \quad \left\{\begin{array}{l}(v_\alpha \mid v_\beta) = (\psi_\alpha \mid \psi_\beta) + \tilde{\mathcal{O}}(1) e^{-\frac{1}{h}\tau_{\alpha\beta}} \quad \text{où} \\ \tau_{\alpha,\beta} = \min\limits_{\substack{j \neq j(\alpha) \\ k \neq j(\beta)}} (d(\mathrm{U}_{j(\alpha)}, \mathrm{U}_j)) + d(\mathrm{U}_j, \mathrm{U}_k) + d(\mathrm{U}_k, \mathrm{U}_{j(\beta)}))\end{array}\right.$$

Introduisons, pour simplifier les notations, la matrice N × N (où N est le nombre de puits)

$$(2.1.20) \qquad \mathscr{D}_{j,k} = \left(e^{-\frac{1}{h}d(\mathrm{U}_j, \mathrm{U}_k)}\right) \stackrel{\text{déf}}{=} \mathrm{I} + \mathscr{D}'_{j,k}.$$

On a donc :

$$(2.1.21) \qquad \begin{aligned}\mathscr{D}'_{j,k} &= 0 \quad \text{si} \quad j = k \\ &= e^{-\frac{1}{h}d(\mathrm{U}_j, \mathrm{U}_k)} \quad \text{si} \quad j \neq k.\end{aligned}$$

Avec ces nouvelles notations, $e^{-\frac{1}{h}\tau_{\alpha,\beta}}$ est $\mathcal{O}(1)$ fois l'élément $(\mathscr{D}'\mathscr{D}\mathscr{D}')_{j,k}$ avec $j = j(\alpha)$, $k = j(\beta)$.

Par abus de langage, on notera $(\mathscr{D}'\mathscr{D}\mathscr{D}')_{\alpha,\beta}$ un tel terme. Avec ces conventions, on réécrit (2.1.19) sous la forme

$$(2.1.22) \qquad (v_\alpha \mid v_\beta) - (\psi_\alpha \mid \psi_\beta) = \tilde{\mathcal{O}}(\mathscr{D}'\mathscr{D}\mathscr{D}') = \tilde{\mathcal{O}}(\mathscr{D}'^2 + \mathscr{D}'^3).$$

Remarquons maintenant que, compte tenu de (2.1.4), (2.1.6) et (2.1.7), on a :

$$(2.1.23) \qquad \begin{aligned}(\psi_\alpha \mid \psi_\beta) &= \delta_{\alpha\beta} + \tilde{\mathcal{O}}(\mathscr{D}'^2) \quad \text{si} \quad j(\alpha) = j(\beta) \\ &= \tilde{\mathcal{O}}(\mathscr{D}') \qquad\qquad \text{si} \quad j(\alpha) \neq j(\beta).\end{aligned}$$

Posons :

$$(2.1.24) \qquad \mathrm{T} = (t_{\alpha\beta}) = \left\{\begin{array}{ll}0 & \text{si} \quad j(\alpha) = j(\beta) \\ (\psi_\alpha \mid \psi_\beta) & \text{si} \quad j(\alpha) \neq j(\beta).\end{array}\right.$$

On réécrit (2.1.22) sous la forme :

$$(2.1.25) \quad \left\{\begin{array}{l}(v_\alpha \mid v_\beta) = \delta_{\alpha,\beta} + t_{\alpha,\beta} + r_{\alpha,\beta} \quad \text{avec} \quad r_{\alpha,\beta} = \tilde{\mathcal{O}}(\mathscr{D}'^2 + \mathscr{D}'^3) \\ \text{ou encore} \\ \mathrm{V} = \mathrm{I} + \mathrm{T} + \mathrm{R}.\end{array}\right.$$

Pour $\kappa \in \mathbb{R}$, regardons ensuite

$$\mathrm{V} = \mathrm{I} + \kappa(\mathrm{T} + \mathrm{R}) + \mathrm{C}_2(\mathrm{T} + \mathrm{R})^2 + \ldots$$

D'après l'inégalité triangulaire, on a :

$$\mathscr{D}'^4 = \mathscr{O}(\mathscr{D}'^2)$$

de sorte que :

(2.1.26) $$\mathscr{D}'^n = \begin{cases} \mathscr{O}(\mathscr{D}'^2) & \text{si} \quad n \geqslant 2 \text{ est pair} \\ \mathscr{O}(\mathscr{D}'^3) & \text{si} \quad n \geqslant 3 \text{ est impair}. \end{cases}$$

L'inégalité triangulaire permet également d'obtenir :

(2.1.27) $$\mathscr{D}'^2 = \mathscr{O}(\mathrm{I} + \mathscr{D}').$$

Puisque $\mathrm{T} = \tilde{\mathscr{O}}(\mathscr{D}')$, $\mathrm{R} = \tilde{\mathscr{O}}(\mathscr{D}'^2 + \mathscr{D}'^3)$, on trouve :

(2.1.28) $$\mathrm{V}^\kappa = \mathrm{I} + \kappa \mathrm{T} + \tilde{\mathscr{O}}(\mathscr{D}'^2 + \mathscr{D}'^3).$$

Les dérivées (à tout ordre) des fonctions φ_α, ψ_α, $v_\alpha - \psi_\alpha$, v_α vérifient aussi les estimations (2.1.7), (2.1.17), (2.1.18). L'argument qui donnait (2.1.19) et (2.1.22) donne aussi :

(2.1.29) $$((v_\alpha \mid \mathrm{P}v_\beta) - (\psi_\alpha \mid \mathrm{P}\psi_\beta) = -(v_\alpha - \psi_\alpha \mid \mathrm{P}(v_\beta - \psi_\beta)) = \tilde{\mathscr{O}}(\mathscr{D}'^2 + \mathscr{D}'^3).$$

Ici :

(2.1.30) $$\begin{aligned}(\psi_\alpha \mid \mathrm{P}\psi_\beta) &= \frac{1}{2}((\psi_\alpha \mid \mathrm{P}\psi_\beta) + (\mathrm{P}\psi_\alpha \mid \psi_\beta)) \\ &= \frac{1}{2}(\mu_\alpha + \mu_\beta)(\psi_\alpha \mid \psi_\beta) + \frac{1}{2}((\psi_\alpha \mid r_\beta) + (r_\alpha \mid \psi_\beta)).\end{aligned}$$

Tenant compte de (2.1.23), (2.1.24), on obtient alors :

(2.1.31) $$\begin{aligned}((\psi_\alpha \mid \mathrm{P}\psi_\beta)) = \operatorname{diag}(\mu_\alpha) &+ \frac{1}{2}\mathrm{T}\,.\operatorname{diag}\mu_\alpha + \frac{1}{2}\operatorname{diag}(\mu_\alpha)\mathrm{T} \\ &+ \frac{1}{2}(\psi_\alpha \mid r_\beta) + (r_\alpha \mid \psi_\beta)) + \tilde{\mathscr{O}}(\mathscr{D}'^2).\end{aligned}$$

Comme dans [*11*], on a :

(2.1.32) $$\begin{aligned}(\psi_\alpha \mid r_\beta) &= w_{\alpha,\beta} + h^2 \int \varphi_\beta \,.\, \nabla\chi_{j(\beta)} \,.\, \varphi_\alpha \nabla \chi_{j(\alpha)} dx \\ &= w_{\alpha,\beta} + \tilde{\mathscr{O}}(\mathscr{D}'^2)\end{aligned}$$

où

(2.1.33) $$w_{\alpha\beta} = h^2 \int \chi_{j(\alpha)}(\varphi_\beta \nabla \varphi_\alpha - \varphi_\alpha \nabla \varphi_\beta)\nabla\chi_{j(\beta)} dx = \tilde{\mathscr{O}}(\mathscr{D}').$$

Soit alors :

(2.1.34) $$\hat{w}_{\alpha,\beta} = \frac{1}{2}(w_{\alpha,\beta} + w_{\beta,\alpha}), \qquad \hat{\mathrm{W}} = (\hat{w}_{\alpha\beta}).$$

Alors (2.1.31) donne :

(2.1.35) $$\begin{aligned}((\psi_\alpha \mid \mathrm{P}\psi_\beta)) = \operatorname{diag}(\mu_\alpha) &+ \frac{1}{2}\mathrm{T}\,.\operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \frac{1}{2}\operatorname{diag}(\mu_\alpha)\,.\,\mathrm{T} \\ &+ \hat{\mathrm{W}} + \tilde{\mathscr{O}}(\mathscr{D}'^2)\end{aligned}$$

et avec (2.1.29) on obtient :

$$(2.1.36)\quad (v_\alpha \mid \mathrm{P}v_\beta) = \operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \frac{1}{2}\mathrm{T}\operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \frac{1}{2}\operatorname{diag}(\mu_\alpha).\mathrm{T} + \hat{\mathrm{W}} + \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3).$$

La matrice de $\mathrm{P}|_\mathrm{F}$ pour la base orthonormalisée des (v_α) :

$$\vec{e} = \vec{v}\,.\,\mathrm{V}^{-1/2}$$

est égale à :

$$\mathrm{V}^{-1/2}((v_\alpha \mid \mathrm{P}v_\beta))\mathrm{V}^{-1/2}.$$

D'après (2.1.25) et (2.1.36), cette matrice vaut :

$$(2.1.37)\quad \left(\mathrm{I} - \frac{1}{2}\mathrm{T} + \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3)\right)\left(\operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \frac{1}{2}\mathrm{T}\operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\operatorname{diag}(\mu_\alpha)\mathrm{T} + \hat{\mathrm{W}} + \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3)\right)\left(\mathrm{I} - \frac{1}{2}\mathrm{T} + \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3)\right).$$

Si on se rappelle que : T, $\hat{\mathrm{W}} = \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}')$, l'expression (2.1.37) se réduit à :

$$(2.1.38)\qquad \operatorname{diag}\mu_\alpha + \hat{\mathrm{W}} + \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3).$$

On a donc montré le :

THÉORÈME 2.1.2. — *La matrice* A *de* $\mathrm{P}|_\mathrm{F}$ *dans la base orthonormalisée* $\vec{e} = \vec{v}\,.\mathrm{V}^{-1/2}$ *est donnée par (2.1.38), où* $\hat{\mathrm{W}}$ *est défini par (2.1.33) et (2.1.34) (cf. également 2.1.32).*

COROLLAIRE 2.1.3. — *(cf. Théorème 2.10 de [11]).*
La matrice A *de* P/F *dans la base orthonormalisée :* $\vec{e} = \vec{v}\,.\,\mathrm{V}^{-1/2}$ *est donnée par :*

$$(2.1.39)\qquad \operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \hat{\mathrm{W}} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2\mathrm{S}_0/h})$$

où

$$\mathrm{S}_0 = \inf_{j \neq k} d(\mathrm{U}_j, \mathrm{U}_k).$$

Démonstration. — C'est immédiat compte tenu de (2.1.21).

REMARQUE 2.1.4. — *Lien avec la méthode L. C. A. O.* — La méthode L. C. A. O. des chimistes associée à la famille de fonctions propres approchées ψ_α nous dit de regarder l'équation « séculaire »

$$\det((\mathrm{P}(h)\psi_\alpha \mid \psi_\beta)) - \lambda((\psi_\alpha \mid \psi_\beta))) = 0$$

où encore (avec $\mathrm{S} = ((\psi_\alpha \mid \psi_\beta))$)

$$\det(\mathrm{S}^{-1/2}((\mathrm{P}(h)\psi_\alpha \mid \psi_\beta))\mathrm{S}^{-1/2} - \lambda) = 0.$$

On laisse au lecteur le soin de vérifier que :

(2.1.40) $S^{-1/2}((P(h)\psi_\alpha \mid \psi_\beta))S^{-1/2} = \operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \hat{W}_{\alpha,\beta} + \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3).$

2.2. **Estimations sur la résolvante.**

On se propose dans ce sous-paragraphe de démontrer le lemme 2.1.1. Cependant le champ d'application des résultats présentés va bien au-delà et nous en verrons d'autres utilisations dans [*12*].

Soit M une variété C^∞ compacte (éventuellement à bord, avec bord C^∞). On se propose de décrire la taille des noyaux-distributions de divers opérateurs. Ces estimations ne sont pas ponctuelles. Aussi on introduira la terminologie suivante.

DÉFINITION 2.2.1. — *Soit* $\mathcal{I} \subset]0,1]$ *t. q.* $0 \in \bar{\mathcal{I}}$ *et soit* $A = A_h (h \in \mathcal{I})$ *une famille d'opérateurs bornés de* $L^2(M)$ *dans* $H^1(M)$.

Soit $f \in C^0(M \times M; \mathbb{R})$; *on dira que* :

« *le noyau* $A(x, y)$ de A est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-f(x,y)/h})$ »

si pour tous $x_0, y_0 \in M$, $\varepsilon > 0$, *il existe des voisinages* $V \subset M$ *de* x_0, $U \subset M$ *de* y_0 *et une constante* $C_\varepsilon > 0$ *tels que* :

$$\| Au \|_{H^1(V)} \leqslant C_\varepsilon e^{-(f(x_0,y_0)-\varepsilon)/h} \| u \|_{L^2(U)}$$

pour tout $h \in \mathcal{I}$, *tout* $u \in L^2(M)$ *t. q. supp* $u \subset U$ (*éventuellement, on pourra remplacer* $e^{-f/h}$ *par une somme finie de termes du même type*).

REMARQUE 2.2.2. — Si A et f sont comme dans la définition et si $B = B_h$ et $g \in C^0(M \times M; R)$ est un deuxième couple comme dans la définition, alors le noyau de $B \circ A$ est $\hat{\mathcal{O}}(e^{-h(x,y)/h})$ où

$$h(x, y) = \min_{z \in M} (g(x, z) + f(z, y)).$$

REMARQUE 2.2.3. — Soient $\varphi, \psi \in C^0(M)$ t. q. :

$$\varphi(x) \geqslant -f(x, y) + \psi(y), \qquad \forall (x, y) \in M \times M. \tag{2.2.1}$$

Alors, pour tout $\varepsilon > 0$, on a :

$$\| Au \|_{L^2(e^{-2\varphi/h}dx)} \leqslant C_\varepsilon e^{\varepsilon/h} \| u \|_{L^2(e^{-2\psi/h}dx)} \qquad \forall u \in L^2(M). \tag{2.2.2}$$

Soit $P = -h^2\Delta + V$, $h \in \mathcal{I}$ comme précédemment. On considère d'abord le cas où M contient un seul puits U de diamètre 0 pour la distance d'Agmon.

Nous voulons étudier la résolvante $(P - z)^{-1}$ avec z éventuellement complexe.

On utilisera l'inégalité d'Énergie suivante (cf. [*11*] dans le cas où les fonctions u sont réelles) :

Pour $u \in D(P)$, (où P désigne la réalisation de Dirichlet si M est à bord), $z \in \mathbb{C}$, on a :

$$\text{(2.2.3)} \qquad \operatorname{Re}((P - z)u, e^{2\phi/h}u) = h^2 \| \nabla e^{\phi/h} u \|^2 + \int_M (V - \operatorname{Re} z - |\nabla \phi|^2) e^{2\phi/h} u\bar{u}\, dx .$$

Comme dans [*11*], on déduit de (2.2.3) toute une série de contrôles sur la décroissance des solutions que nous ne détaillerons pas toujours ici.

Soit $K_h \subset \mathbb{C}$, $h \in \mathscr{I}$ une famille de compacts avec $K_h \to \{0\}$, $h \to 0$.

Soit $a > 0$ et supposons que :

(2.2.4) Pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $C_\varepsilon > 0$ telle que :

$$\operatorname{dist}(K_h, S_p P_M) \geqslant \frac{1}{C_\varepsilon}(e^{-(a+\varepsilon)/h}), \qquad h \in \mathscr{I} .$$

Pour $\eta > 0$ petit, soient $\theta \in C_0^\infty(B(U, 2\eta))$ égale à 1 dans un voisinage de $\overline{B(U, \eta)}$, $\hat{\theta} \in C_0^\infty(B(U, 4\eta))$ égale à 1 dans un voisinage de $\overline{B(U, 2\eta)}$.

Si $M_0 = M \backslash B(U, \eta)$, on remarque que K_h est bien séparé du spectre de P_{M_0} (η étant fixé) (car $V > 0$ sur M_0) (pour h assez petit) et les inégalités d'énergie (dont la principale est rappelée en (2.2.3)) montrent que :

(2.2.5) Le noyau de $(P_{M_0} - z)^{-1}$ est $\hat{\mathcal{O}}(e^{-d(x,y)/h})$ (uniformément par rapport à $z \in K_h$).

Remarquons ensuite que :

$$\text{(2.2.6)} \quad (P_M - z)^{-1} = (1-\theta)(P_{M_0}-z)^{-1}(1-\hat{\theta}) + (P_M-z)^{-1}\hat{\theta} + (P_M-z)^{-1}\hat{\theta}[P, \theta](P_{M_0}-z)^{-1}(1-\hat{\theta}) .$$

On déduit de (1) que la norme dans $\mathscr{L}(L^2, L^2)$ de $(P_M - z)^{-1}$ est $\mathcal{O}_\varepsilon(e^{(a+\varepsilon)/h})$ pour tout $\varepsilon > 0$, et à l'aide d'une inégalité *a priori* grossière, on a la même estimation pour la norme dans $\mathscr{L}(L^2, H^1)$.

Combinant ceci avec les inégalités d'énergie « hors puits » (cf. 2.2.3 et les résultats de [*11*]), on obtient que :

(2.2.7) Le noyau de $(P_M - z)^{-1}\hat{\theta}$ est $\hat{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{d(x,U)}{h} + \frac{a}{h} + \frac{4\eta}{h}}\right)$.

Combinant (2.2.5), (2.2.6), (2.2.7) et la remarque 2.2.2, on trouve que :

(2.2.8) Le noyau de $(P_M - z)^{-1}$ est :

$$\hat{\mathcal{O}}(e^{-d(x,y)/h}) + \hat{\mathcal{O}}(e^{-(d(x,U)/h + d(U,y)/h) + a/h + 8\eta/h}) .$$

Puisque l'on peut prendre $\eta > 0$ arbitrairement petit et qu'il suffit de montrer l'estimation qui suit pour h assez petit, on obtient la :

PROPOSITION 2.2.4. — *Dans le cas d'un seul puits et sous l'hypothèse (2.2.4),*

(2.2.9) *Le noyau de* $(P_M - z)^{-1}$ *est*

$$\widehat{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{d(x,y)}{h}} + e^{\frac{a}{h} - \frac{(d(x_1U)+d(U,y))}{h}}\right)$$

uniformément par rapport à z dans $K(h)$.

La fin de ce sous-paragraphe est consacrée à l'étude de multi-puits et sera utilisée aussi dans [*12*].

Considérons maintenant le cas où M (compact sans bord) contient un nombre fini de puits $U_1, \ldots, U_N$, chaque puits étant de diamètre 0. Pour $\eta > 0$ petit mais fixé, on pose, comme au §.2.1,

$$M_j = M \backslash \bigcup_{k \neq j} B(U_k, \eta) \tag{2.2.10}$$

($B(U_k, \eta)$ étant éventuellement légèrement modifié pour que le bord de M_j soit C^∞).

Soit

$$S_j = \min_{k \neq j} d(U_j, U_k). \tag{2.2.11}$$

Avec K_h ($h \in \mathscr{I}$) comme précédemment, on suppose qu'il existe $a_j \in [0, 2S_j[$ t. q., pour tout $\varepsilon > 0$, on ait :

$$\operatorname{dist}(K_h, S_p P_{M_j}) \geqslant \frac{1}{C_\varepsilon} e^{-\frac{(a_j+\varepsilon)}{h}}. \tag{2.2.12}$$

Remarquons que si $2\eta < 2S_j - a_j$, cette hypothèse ne dépend pas du choix de η.

Soit $\theta_j \in C_0^\infty(B(U_j, 2\eta))$, égale à 1 dans un voisinage de $\overline{B(U_j, \eta)}$ et posons comme au §.2.1

$$\chi_j = 1 - \sum_{k \neq j} \theta_k. \tag{2.2.13}$$

Soit $\tilde{\chi}_j \in C_0^\infty(\overset{\circ}{M}_j)$, *indépendante de* η t. q. :

$$\sum_j \tilde{\chi}_j = 1. \tag{2.2.14}$$

Si $\eta > 0$ est assez petit, on a :

$$\operatorname{supp} \tilde{\chi}_j \cap \operatorname{supp}(1 - \chi_j) = 0. \tag{2.2.15}$$

Pour construire, la résolvante de $P = P_M$, on prend comme première approximation :

$$(2.2.16) \qquad R_0 = \sum_1^N \chi_j(P_{M_j} - z)^{-1}\tilde{\chi}_j.$$

Alors :

$$(2.2.17) \qquad (P - z)R_0 = I + \sum_1^N [P, \chi_j](P_{M_j} - z)^{-1}\tilde{\chi}_j$$
$$= I - K$$

où

$$(2.2.18) \qquad K = \sum\sum_{k \neq j} [P, \theta_k](P_{M_j} - z)^{-1}\tilde{\chi}_j.$$

On obtient alors, sous réserve de vérifier la convergence de la série :

$$(2.2.19) \qquad (P - z)^{-1} = R_0 + \sum_{l=1}^{\infty} R_0K^l.$$

Pour $l \geqslant 1$, on trouve :

$$(2.2.20) \quad R_0K^l = \sum_{\substack{j_0 \neq j_1 \\ j_1 \neq j_2 \\ \vdots \\ j_{l-1} \neq j_l}} \chi_j^0((P_{M_{j0}} - z)^{-1}[P, \theta_{j_0}]) \times$$
$$\times ((P_{M_{j_1}} - z)^{-1}[P, \theta_{j1}]) \dots ((P_{M_{j_{l-1}}} - z)^{-1}[P, \theta_{j_{l-1}}])(P_{M_{j_l}} - z)^{-1}\tilde{\chi}_{j_l}.$$

Le noyau du terme général est donc :

$$\hat{\mathcal{O}}\Big((e^{-\frac{d(x,U_{j0})}{h} + \frac{a_{j0}}{h} - \frac{d(U_{j0},U_{j0})}{h} + \frac{a_{j1}}{h} - \dots - \frac{d(U_{jl-2},U_{jl-1})}{h} + \frac{a_{jl-1}}{h}}) \times$$
$$(2.2.21) \qquad \times \Big[e^{-\frac{d(U_{jl-1},y)}{h}} + e^{-\frac{d(U_{jl-1},U_{jl})}{h} + \frac{a_{jl}}{h} + \frac{d(U_{jl},y)}{h}}\Big] \times (e^{\frac{4\eta(l+1)}{h}})\Big).$$

Soit $\mathscr{D}'$ la matrice $N \times N$ introduite en (2.1.21) et :

$$(2.2.22) \qquad \mathscr{A} = \operatorname{diag}(e^{\frac{a_j}{h}}).$$

On introduit également la matrice colonne :

$$(2.2.23) \qquad T(y) = (e^{-d(U_j,y)/h}).$$

Alors, d'après 2.2.8 :

Le noyau de R_0 est $\hat{\mathcal{O}}(e^{-\frac{d(x,y)}{h}} + {}^tT(x)\mathscr{A}.T(y))$ et, pour $l \geqslant 1$,

Le noyau de R_0K^l est

$$\tilde{\mathcal{O}}({}^tT(x)\mathscr{A}(\mathscr{D}'\mathscr{A})^{l-1}T(y) + {}^tT(x)\mathscr{A}(\mathscr{D}'\mathscr{A})^lT(y)).e^{4(l+1)\eta/h}.$$

Cette majoration devient plus transparente si l'on introduit :

$$(2.2.24)\qquad \begin{cases} \mathcal{D}'_a = \mathcal{A}^{1/2}\mathcal{D}'\mathcal{A}^{1/2} \\ \mathrm{T}_a(y) = \mathcal{A}^{1/2}\mathrm{T}(y)\,. \end{cases}$$

Alors :

(2.2.25) le noyau de R_0 est $\hat{\mathcal{O}}({}^t\mathrm{T}_a(x)\mathrm{T}_a(y) + e^{-d(x,y)/h})$

et

(2.2.26) le noyau de R_0K^l est

$$(e^{4\eta/h})^{(l+1)}\hat{\mathcal{O}}({}^t\mathrm{T}_a(x)((\mathcal{D}'_a)^{l-1} + (\mathcal{D}'_a)^l)\mathrm{T}_a(y))\,.$$

On fait l'hypothèse :

$$(2.2.27)\qquad d(\mathrm{U}_j, \mathrm{U}_k) - \frac{a_j}{2} - \frac{a_k}{2} > 0 \qquad \forall j \neq k\,.$$

Il est alors clair, que si $\eta > 0$ est assez petit, la série de Neumann (2.2.18) converge exponentiellement vite dans $\mathcal{L}(\mathrm{L}^2, \mathrm{H}^1)$.

Si l'on veut majorer le noyau de $(\mathrm{P} - z)^{-1}$ il suffit alors de le faire pour un nombre fini de termes (indépendant de η pour $0 < \eta < \eta_0$) du début de la série (2.2.18).

On constate maintenant que :

$$(2.2.28)\qquad \mathcal{D}'_a = ((1 - \delta_{jk})e^{-\tilde{d}_{j,k}/h})$$

où $\tilde{d}_{jk} = d(\mathrm{U}_j, \mathrm{U}_k) - \frac{a_j}{2} - \frac{a_k}{2} = d\left(\mathrm{B}\left(\mathrm{U}_j, \frac{a_j}{2}\right), \mathrm{B}\left(\mathrm{U}_k, \frac{a_k}{2}\right)\right) > 0\,.$

Le coefficient (j, k) de la matrice $(\mathcal{D}')^{\mathrm{M}}$ se majore par $\mathrm{C_M}\,.\exp(-f_{jk}/h)$ où

(2.2.29) $f_{j,k}$ est le plus court chemin que l'on parcourt en sautant N-fois entre les différentes boules $\mathrm{B}(\mathrm{U}_\nu, a_\nu/2)$, commençant par $\mathrm{B}(\mathrm{U}_j, a_j/2)$ et finissant en $\mathrm{B}(\mathrm{U}_k, a_k/2)$ (où on ne compte pas les déplacements dans les boules).

Puisqu'il n'y a que N-boules, on est obligé de passer 2 fois par la même boule dès que $\mathrm{M} \geqslant \mathrm{N}$. Si :

$$(2.2.30)\qquad \tilde{\mathrm{T}}_0 = \min_{j \neq k} \tilde{d}_{jk}$$

on trouve, pour $\mathrm{M} \geqslant \mathrm{N}$

$$(2.2.31)\qquad (\mathcal{D}'_a)^{\mathrm{M}} \leqslant \mathrm{C_M}e^{-2\tilde{\mathrm{T}}_0/h}[\mathrm{I} + (\mathcal{D}'_a) + \ldots + (\mathcal{D}'_a)^{\mathrm{N}-1}]$$

où « $\leqslant$ » indique l'inégalité au niveau de chaque coefficient de la matrice.

La proposition (2.2.4) relative à un puits admet donc l'extension suivante :

PROPOSITION 2.2.5. — *Sous les hypothèses (2.2.12), (2.2.27), le noyau de la résolvante* $(P_M - z)^{-1}$ *vérifie, pour* $z \in K(h)$, *l'estimation* :

$$(2.2.32) \quad \hat{\mathcal{O}}(e^{-d(x,y)/h} + {}^tT_a(x)(I + \mathcal{D}'_a + \ldots + (\mathcal{D}'_a)^{N-1})T_a(y)).$$

Quand $a_j = 0$, $\forall_j$, *on obtient plus simplement*

$$(2.2.33) \qquad \hat{\mathcal{O}}(e^{-\check{d}(x,y)/h}).$$

On remarque que (2.2.32) s'écrit aussi :

$$(2.2.32') \qquad \hat{\mathcal{O}}(e^{-\check{d}(x,y)/h}),$$

où

$$\check{d}(x, y) = \min_{\substack{0 \leqslant l \leqslant N-1 \\ j_1 \neq j_2 \neq \ldots \neq j_l}} \left(\left(d(x, U_{j_l}) - \frac{a_{j_l}}{2}\right) + \tilde{d}_{j_l, j_{l-1}} + \ldots + \tilde{d}_{j_2, j_1} + \left(-\frac{a_{j_1}}{2} + d(U_{j_1}, y)\right)\right).$$

(Pour $l = 0$ l'expression après le « min » est définie comme $d(x, y)$). On observe que $\check{d}$ peut prendre des valeurs négatives, mais que pour x et y dans $\tilde{M} = M \backslash \bigcup_{j=1}^{N} B(U_j, a_j/2)$, $\check{d}(x, y)$ est la distance de y à x pour la métrique dégénérée, égale à 0 dans $M \backslash \tilde{M}$ et $\sqrt{V}dx^2$ dans $\tilde{M}$.

Démonstration du lemme 2.1.1. — On applique la proposition (2.2.5) avec $\Gamma(h) = K(h)$ et $a_j = 0$. Compte tenu de (2.1.14), on en déduit (cf. remarque 2.2.3) que

$$\text{grad } v_\alpha^z, \qquad v_\alpha^z = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h} \inf [d(x,y) + \delta_{j(\alpha)}(y)]}\right)$$

et l'inégalité triangulaire montre que :

$$\delta_{j(\alpha)}(x) \leqslant d(x, y) + \delta_{j(\alpha)}(y)$$

pour tout y.

Une fois contrôlés v_α^z et grad v_α^z, les autres estimations se déduisent d'inégalités *a priori* grossières en revenant à l'équation : $(P - z)v_\alpha^z = r_\alpha$. ■

Application à la décroissance des fonctions propres.

Soit $\varphi(h)\,(h \in J)$ une famille de fonctions propres de $P(h)$ défini sur M :

$$(2.2.34) \qquad P(h)\varphi(h) = \lambda(h)\varphi(h)$$

et on suppose que $\lambda(h) \to 0$ (lorsque $h \to 0, h \in \mathcal{J}$).

Supposons qu'on ait une répartition de $\mathcal{P} = V^{-1}(]-\infty, 0])$ entre puits résonnants et non résonnants :

$$(2.2.35) \quad \mathcal{P} = \mathcal{P}_1 \cup \mathcal{P}_2 \quad \text{avec} \quad \mathcal{P}_1 = \bigcup_{j=1}^{N_0} U_j, \qquad \mathcal{P}_2 = \bigcup_{j=N_0+1}^{N} U_j.$$

On entend ici, par $\mathscr{P}_2$ non résonnant, les propriétés suivantes :

(2.2.36) $\quad \forall i = N_0 + 1, \ldots, N, \qquad a_i \in [0, 2S_i[$

(2.2.37) $\quad a_i + a_j < 2d(U_j, U_k), \qquad \text{si} \quad i \neq j$

(2.2.38) $\quad d(\lambda(h), S_p P_{M_j}) \geqslant \frac{1}{C_\varepsilon} e^{-(a_j+\varepsilon)/h}, \qquad j = N_0 + 1, \ldots, N.$

Ces conditions ne sont pas suffisantes pour impliquer la non-résonance, mais ce sera sûrement le cas si par exemple on fait l'hypothèse supplémentaire :

(2.2.39) $\quad \check{d}(U_j, U_k) > 0, \qquad 1 \leqslant j \leqslant N_0, \qquad N_0 + 1 \leqslant k \leqslant N.$

Ici, avec $a_i = 0$ pour $1 \leqslant i \leqslant N_0$, on définit $\check{d}$ comme dans (2.2.32'). Alors on a :

PROPOSITION 2.2.6. — *Sous les hypothèses (2.2.34) à (2.2.38), on a*

(2.2.40)
$$\varphi(h)(x) = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}\max\left(\min_{1 \leqslant j \leqslant N} d(x,U_j),\ \min_{1 \leqslant j \leqslant N_0} \check{d}(x,U_j)\right)}\right)$$

COROLLAIRE 2.2.7. — *Si* $a_j = 0$ *pour* $j = N_0 + 1, \ldots, N$, *alors*

(2.2.41)
$$\varphi(h)(x) = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}\min_{1 \leqslant j \leqslant N_0} d(x,U_j)}\right).$$

Bien entendu, on a les mêmes majorations pour les dérivées de φ.

Démonstration. — Soit $M_\eta^{(1,\ldots,N_0)} = M \setminus \bigcup_{j=1}^{N_0} B(U_j, \eta)$, et $\chi^\eta = 1 - \sum_{j=1}^{N_0} \theta_j^\eta$ (cf. 2.1.3, 2.1.6). On applique la Proposition 2.2.5 qui reste variable avec M remplacé par $M_\eta^{(1,\ldots,N_0)}$ et on remarque que

$$\chi^\eta \varphi = (P_{M_\eta}(1, \ldots, N_0)^{-2})^{-1}([P, \chi_\eta]\varphi).$$

On obtient ainsi que pour tout $\varepsilon > 0$ et tout $\eta > 0$:

$$|\varphi(x)| \leqslant C_{\varepsilon,\eta} e^{(4\eta+\varepsilon)/h} e^{-\frac{1}{h}\min_{j=1,\ldots,N_0} \check{d}(x,U_j)},$$

et des estimations du même type pour les dérivées. On obtient donc

(2.2.42)
$$\varphi(x) = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}\min_{j=1,\ldots,N_0} \check{d}(x,U_j)}\right).$$

Alors (2.2.41) se déduit de (2.2.42) et de l'estimation

(2.2.43)
$$\varphi(x) = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}\min_{j=1,\ldots,N} d(x,U_j)}\right).$$

déjà obtenue dans [*11*].

REMARQUE 2.2.8. — Sous l'hypothèse (2.2.39) on déduit de (2.2.41) que les puits U_j sont effectivement non-résonnants pour $j = N_0 + 1, \ldots, N$, c.à.d. que l'énergie de φ dans les boules $B(U_j, a_j/2)$, $j = N_0 + 1, \ldots, N$ est exponentiellement petite.

2.3. **Interaction moléculaire.**

On se propose dans ce sous-paragraphe de montrer comment le théorème 2.1.2 donne des informations beaucoup plus précises quand on donne des informations supplémentaires sur la disposition des puits en molécules.

On décompose cette fois-ci $\mathscr{P}$ en une union de q « molécules » $\mathscr{M}_j$ disjointes

$$V^{-1}(]-\infty, 0]) \overset{\text{déf}}{\equiv} \mathscr{P} = \bigcup_{j=1}^{q} \mathscr{M}_j \tag{2.3.1}$$

et chacune de ces molécules est elle-même une union de N_j « atomes »

$$\mathscr{M}_j = \bigcup_{k=1}^{N_j} U_{j,k}. \tag{2.3.2}$$

Pour chaque molécule $\mathscr{M}_j$, on définit :

$$\left\{ \begin{aligned} S_j &= \inf_{(j,k) \neq (j',k')} d(U_{j,k}, U_{j',k'}) \\ \tilde{S}_j &= \inf_{j' \neq j} d(U_{j,k}, U_{j',k'}) = \inf_{j \neq j'} d(\mathscr{M}_j, \mathscr{M}_{j'}). \end{aligned} \right. \tag{2.3.3}$$

On a bien entendu : $S_j \leqslant \tilde{S}_j$ et on pose :

$$S_0 = \inf_j S_j, \qquad \tilde{S}_0 = \inf_j \tilde{S}_j. \tag{2.3.4}$$

Le théorème 2.1.2 admet le corollaire suivant :

THÉORÈME 2.3.1. — *On réindice les ψ_α sous la forme $\psi_{j,k,l}$ (j indiquant cette fois-ci la molécule, k indiquant l'atome).*

Alors la matrice de $P|_F$ dans la base $\vec{e} = \vec{v} \,.\, V^{-1/2}$ est donnée par :

$$A = C + R \tag{2.3.5}$$

où

$$C = \operatorname{diag}(\mu_\alpha) + ((\hat{w}_{\alpha,\beta})) \tag{2.3.6}$$

et

$$\left\{ \begin{aligned} r_{\alpha,\beta} &= \tilde{\mathscr{O}}\left(e^{-\frac{2S_{j(\alpha)}}{h}}\right) \qquad si \qquad j(\alpha) = j(\beta) \\ r_{\alpha,\beta} &= \tilde{\mathscr{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}\inf(S_{j(\alpha)}+\tilde{S}_{j(\beta)}, S_{j(\beta)}+\tilde{S}_{j(\alpha)})}\right) \qquad si \qquad j(\alpha) \neq j(\beta). \end{aligned} \right. \tag{2.3.7}$$

En particulier, on a :

$$(2.3.8)\qquad \begin{cases} r_{\alpha,\beta} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) & si \quad j(\alpha) = j(\beta) \\ r_{\alpha,\beta} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0+\tilde{S}_0)/h}) & si \quad j(\alpha) \neq j(\beta)\,. \end{cases}$$

Démonstration. — C'est une conséquence immédiate de (2.1.38) et (2.1.21). ■

Exemple d'application : On se contente ici d'utiliser (2.3.8) mais dans certains cas (2.3.7) peut être nécessaire.

On redécompose tout d'abord R sous la forme :

$$(2.3.9)\qquad R = R' + R'' \quad \text{avec} \quad \begin{cases} r''_{\alpha,\beta} = 0 & \text{si} \quad j(\alpha) = j(\beta) \\ r'_{\alpha,\beta} = 0 & \text{si} \quad j(\alpha) \neq j(\beta)\,. \end{cases}$$

Alors :

$$(2.3.10)\qquad \text{et} \quad \begin{cases} B \stackrel{\text{déf}}{=} C + R' \\ R'' = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0+\tilde{S}_0)/h}\,. \end{cases}$$

Un argument de perturbation classique montre que la connaissance des valeurs propres de $b_{\alpha,\beta}$ détermine les valeurs propres de $a_{\alpha,\beta}$ modulo $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0+\tilde{S}_0)/h})$. Ceci permettra en général de conclure sur les écarts observés entre les différentes valeurs propres ; pour ce qui est des multiplicités, la théorie des groupes permet souvent de conclure (cf. § .3).

On écrit maintenant la matrice B par blocs « moléculaires »

$$B = (B^{j,k})_{\substack{j=1,\dots,q \\ k=1,\dots,q}}$$

$B^{j,k}$ correspondant à tous les indices (α, β) t. q. $j(\alpha) = j, j(\beta) = k$.

On redécompose B sous la forme :

$$(2.3.11)\qquad B = B' + B''$$

avec $B' = \delta_{j,k} B^{j,k}$.

On a bien entendu : $B'' = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{S}_0/h})$.

On diagonalise chacun des $B^{j,j}$ à l'aide d'une matrice orthogonale P_j

$${}^tP_j \circ B^{j,j} \circ P_j = \begin{pmatrix} \lambda_j^1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_j^{\nu_j} \end{pmatrix}.$$

Posant $\mathscr{P} = \begin{pmatrix} P_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & P_q \end{pmatrix}$ et $\tilde{B} = ({}^t\mathscr{P} B \mathscr{P})$ on obtient une décomposition analogue à (2.3.11) :

$$(2.3.12)\qquad \tilde{B} = \tilde{B}' + \tilde{B}''$$

avec $\tilde{B}'$ diagonale et $\tilde{B}'' = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{S}_0/h})$.

Supposons que l'on ait une décomposition relative à un ensemble fini $\mathscr{I}$ du spectre de $\tilde{B}'$: $\Sigma_{\tilde{B}'} = \bigcup_{l \in \mathscr{I}} \Sigma_{\tilde{B}'}^{(l)}$ t. q.

$$\text{(2.3.13)} \qquad \begin{cases} d(\Sigma_{\tilde{B}'}^{(l)}, \Sigma_{\tilde{B}'}^{(l')}) \geqslant C e^{-\frac{\alpha_{l,l'}}{h}} \\ \text{avec} \quad \alpha_{l,l'} < \tilde{S}_0, \qquad \forall l \neq l' . \end{cases}$$

Alors quitte à réordonner la nouvelle base, la matrice $\tilde{B}$ devient la matrice par blocs

$$\text{(2.3.14)} \qquad \tilde{\tilde{B}} = (\tilde{\tilde{B}})_{l,l'} \ {}_{(l \in \mathscr{I}, l' \in \mathscr{I})}$$

où $\tilde{\tilde{B}}_{l,l}$ admet comme éléments diagonaux les valeurs propres de $\Sigma_{\tilde{B}'}^{(l)}$ et où $\tilde{\tilde{B}}_{l,l'}$ pour $l \neq l'$ est $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{S}_0/h})$.

Sous les hypothèses précédentes (en particulier 2.3.13), on a alors la proposition :

PROPOSITION 2.3.2. — *Soit $\tilde{\Sigma}^{(l)}$ le spectre de $(\tilde{\tilde{B}})_{l,l}$ et soit $\delta_l = \operatorname{Sup}_{l' \neq l} \alpha_{l,l'}$. Il existe une bijection b de $\cup \tilde{\Sigma}^{(l)}$ sur le spectre de A t. q. :*

$$b(\lambda) - \lambda = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{(S_0 + \tilde{S}_0)}{h}}\right) + \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{[2\tilde{S}_0 - \delta_l]}{h}}\right) \qquad \textit{pour} \qquad \lambda \in \tilde{\Sigma}^{(l)}.$$

Démonstration. — C'est une application immédiate du lemme A.1.1.

§.3. SYMÉTRIES ET INTERACTION

Le contenu de ce paragraphe semblera connu aux chimistes. Son originalité tient dans le fait que, sortant d'une application de la théorie des groupes finis à une méthode formelle (la méthode L. C. A. O.), on s'est efforcé de suivre précisément les erreurs commises (en conservant leurs propriétés d'invariance) dans l'estimation de la matrice d'interaction. Pour des considérations voisines, on pourra consulter [*15*]. Des exemples sont également traités dans [*20*].

3.1. **Action d'un groupe fini.**

Pour ce sous-paragraphe, on se réfère à des articles de [*3*] [*10*] et [*4*].

Soit G un groupe fini agissant isométriquement sur M. Rappelons que M est une variété riemannienne C^∞ compacte ou $\mathbb{R}^n$. Dans le cas de $\mathbb{R}^n$, l'action considérée sera linéaire.

On note :

$$\text{(3.1.1)} \qquad (g, x) \in G \times M \to g.x \in M$$

et on a :

$$d^{M}(gx, gy) = d^{M}(x, y) \tag{3.1.2}$$

(où d^{M} désigne la distance sur M).

On garde les hypothèses du §.2 et on suppose que :

$$\mathscr{P} \equiv V^{-1}(]-\infty, 0]) = \bigcup_{j=1,\dots,N} U_j \tag{3.1.3}$$

où les U_j sont des puits compacts distincts.

On suppose de plus que V est symétrique :

$$V(g.x) = V(x), \qquad \forall g \in G \tag{3.1.4}$$

et on suppose que la décomposition de $\mathscr{P}$ (dans le cas où les U_j ne sont pas connexes) est respectée par G, c. à. d. que l'on a :

$$\forall i, \quad \forall g \in G, \quad \exists j \quad \text{t.q.} \quad gU_i = U_j. \tag{3.1.5}$$

Par (3.1.5), on associe donc à tout $g \in G$ une permutation σ_g sur $[1, \dots, N]$ définie par :

$$g.U_i = U_{\sigma_g(i)}. \tag{3.1.6}$$

On définit ainsi un homomorphisme de G dans le groupe des permutations σ_N.

On note $M(g)$ (ou plus simplement g) l'action naturelle de G sur $L^2(M)$ définie par :

$$L^2(M) \ni u \to (M(g)u)(x) = u(g^{-1}.x). \tag{3.1.7}$$

Les propriétés (3.1.2) et (3.1.4) impliquent que l'opérateur :

$$\left\{\begin{array}{l} P(h) = -h^2\Delta + V \text{ (où } \Delta \text{ est l'opérateur de Laplace-Beltrami} \\ \quad \text{sur M) commute avec } M(g) \text{ en tant qu'opérateur de } C_0^\infty(M) \\ \quad \text{dans } C_0^\infty(M) \end{array}\right. \tag{3.1.8}$$

et que la métrique d'Agmon sup $(V, 0)dx^2$ est invariante par G :

$$d_V(g.x, g.y) = d_V(x, y). \tag{3.1.9}$$

Si comme dans [*11*] et au §.2, on se donne un intervalle $I(h)$ vérifiant les hypothèses convenables, G opère naturellement dans l'espace propre F correspondant aux valeurs propres situées dans $I(h)$ et on a donc :

$$G.F \subset F, \qquad P(h)\,|\,F.M(g)\,|\,F = M(g)\,|\,F.P(h)\,|\,F. \tag{3.1.10}$$

Enfin, on sera souvent amené à faire l'hypothèse que G agit transitivement sur les puits c. à. d. que :

$$\left\{\begin{array}{l} \forall i \neq j \in [1, \dots, N], \qquad \exists g_{ji} \in G \quad \text{t.q.} \\ \qquad\qquad g_{ji}U_i = U_j. \end{array}\right. \tag{3.1.11}$$

Pour tout $i = 1, \ldots, N$, on introduit alors naturellement le sous-groupe G_i de G défini par :

(3.1.12) $$G_i = \{ g \in G,\ gU_i = U_i \}.$$

3.2. **Espaces approchés G-adaptés et interaction.**

On reprend les calculs du § .2, en prenant soin de faire des choix adaptés aux symétries.

Si $(\varphi_{1,l})_{l=1,\ldots,m_1}$ désigne une base de fonctions propres relative au problème de Dirichlet P_{M_1} (on peut toujours supposer que M_1 est G_1-invariant, cf. (2.2), (2.3)), on remarque tout d'abord que compte tenu de (2.2), (2.3) et (3.1.9), l'espace engendré par les $(\varphi_{1,l})$:

(3.2.1) $$D_1 = \{ \varphi_{1,1}, \ldots, \varphi_{1,m_1} \} \text{ est un } G_1\text{-espace}$$

et que :

(3.2.2) La matrice de $M(g)|_{D_1}$ est une matrice unitaire pour tout $g \in G_1$, dans la base $(\varphi_{1,l})$.

Remarquons, maintenant que par un choix convenable des θ_j, on peut toujours assurer que : $M(g).\chi_j = \chi_{\sigma_g(j)}$ et que, par conséquent, si on désigne par E_1 l'espace engendré par les $(\psi_{1,l})$:

(3.2.3) $$E_1 = \chi_1 \circ D_1 \text{ est un } G_1\text{-espace}$$

et

(3.2.4) $\left\{ \begin{array}{l} \text{La matrice de } M(g)|_{E_1} (= M(g)|_{D_1}) \text{ est une matrice unitaire} \\ \quad \text{pour tout } g \in G_1, \text{ dans la base } \psi_{1,l} (l = 1, \ldots, m_1)\text{; on notera} \\ \quad \text{cette matrice : } N^1(g). \end{array} \right.$

Nous sommes maintenant en mesure de construire l'espace propre approché G-adapté attaché à $I(h)$.

Pour tout puits $U_j (j \neq 1)$, on note $g_j = g_{j1}$ l'élément défini en (3.1.11) (on prendra $g_1 = e$) et on pose alors :

(3.2.5) $$\psi_{j,l} = g_j . \psi_{1,l}, \qquad \varphi_{j,l} = g_j . \varphi_{1,l}.$$

On remarque que ces $\psi_{j,l}$ sont bien du type construit au § .2, de sorte que *tous les résultats du § .2 s'appliquent* mais la construction faite va nous permettre de suivre agréablement les symétries. Si on note :

(3.2.6) $\left\{ E_j \text{ l'espace engendré par les } \psi_{j,l}\ (j = 1, \ldots, l) \text{ et } E = \sum_j E_j, \right.$

on a le :

LEMME 3.2.1. — E *est un espace* G-*stable. De plus la matrice* $M(g)^{\Psi}$ *de* g *restreint à* E *dans la base* Ψ $(= \psi_{i,l})$ *est orthogonale.*

Démonstration. — Remarquons tout d'abord que la décomposition (3.2.6) est adaptée à l'action de G, en ce sens que l'on a :

$$g \,.\, E_j = E_{\sigma_g(j)} \,. \tag{3.2.7}$$

Notons ensuite que le lemme serait automatique si la base Ψ était orthogonale ce qui n'est pas le cas. Le dernier point résulte immédiatement du fait que $M(g)^{\Psi}$ est aussi la matrice de g sur l'espace $\overset{n}{\underset{1}{\oplus}} \mathscr{D}_j$ (où $\mathscr{D}_j$ est l'espace engendré par $\varphi_{j,l}$ dans $L^2(M_j)$) dans la base $\varphi_{j,l}$ qui est orthogonale dans $\oplus\, L^2(M_j)$.

REMARQUE 3.2.2. — Si G_1 n'est pas réduit à $\{ e \}$, le choix des g_i (cf. 3.1.11 et 3.2.5) relève d'un certain arbitraire. Si $\psi'_{i,m}$ est une base correspondant à d'autres choix de g_i, le passage de la base Ψ à la base Ψ' se fait à l'aide d'une matrice orthogonale.

La base Ψ étant construite, on pose comme au § . 2.1 :

$$v_\alpha = \Pi_F \psi_\alpha \,. \tag{3.2.8}$$

F étant G-stable et G agissant unitairement dans $L^2(M)$, il est clair que :

$$M(g) \,.\, \Pi_F = \Pi_F \,.\, M(g) \tag{3.2.9}$$

et que par conséquent :

(3.2.10) $\{$ La matrice de $M(g)$ dans la base (v_α) est égale à $M(g)^{\Psi}$.

En particulier, la propriété (3.1.8) se traduit par :

(3.2.11) $\left\{ \begin{array}{l} \text{La matrice de } P(h)\,|_F \text{ dans la base } (v_\alpha) \text{ commute avec } M(g)^{\Psi} \\ \quad \text{pour tout } g \in G. \end{array} \right.$

Comme on l'a déjà remarqué, il est plus agréable de travailler avec des bases orthogonales, c. à. d. (cf. Th. 2.1.2) dans la base : $\vec{e} = \vec{v} \,.\, V^{-1/2}$. Il nous faut donc déterminer la matrice de g dans la base $\vec{e}$.

C'est l'objet du :

LEMME 3.2.3. — *i) La matrice* $V = (v_\alpha \mid v_\beta)$ *commute avec* $M(g)^{\Psi}$.
ii) La matrice de $M(g)$ *dans la base* (e) *est égale à* $M(g)^{\Psi}$.

Compte tenu de (3.2.10) et de la définition de $\vec{e}$ le point *ii*) résulte de *i*). Montrons donc *i*) :

$M^{\Psi}(g)$ étant unitaire d'après le lemme 3.2.1, on a :

$$M^{\Psi}(g^{-1}) = (M^{\Psi}(g))^{-1} = {}^t M^{\Psi}(g) \,.$$

On a donc :

$$\begin{aligned}(\mathrm{M}^{\Psi}(g)\circ \mathrm{V})_{\alpha,\beta} &= \sum \mathrm{M}^{\Psi}(g)_{\alpha,\gamma}\circ \mathrm{V}_{\gamma,\beta} = \left(\sum_{\gamma} [\mathrm{M}^{\Psi}(g)]_{\alpha,\gamma} v_{\gamma} \mid v_{\beta}\right)\\ &= \left(\sum_{\gamma} [\mathrm{M}^{\Psi}(g^{-1})]_{\gamma,\alpha} v_{\gamma} \mid v_{\beta}\right)\\ &= (g^{-1}v_{\alpha}, v_{\beta}) \qquad (\text{d'après } 3.2.10).\end{aligned}$$

On montre de même que :

$$(\mathrm{V}\circ \mathrm{M}^{\Psi}(g))_{\alpha,\beta} = (v_{\alpha}, g\,.\,v_{\beta})$$

g agissant unitairement dans $L^2(M)$, le lemme en résulte.

Le lemme 3.2.3 nous a donc permis d'écrire que :

(3.2.12) $\left\{\begin{array}{l}\text{La matrice de } P(h)\,|_{F} \text{ dans la base } (\vec{e}) \text{ commute avec } M(g)^{\Psi}\\ \quad\text{pour tout } g\in G.\end{array}\right.$

Pour avoir un analogue G-invariant pleinement satisfaisant du théorème 2.1.2, il nous faut montrer que chacun des termes apparaissant dans la décomposition (2.1.38) est G-invariant.

On vérifie tout d'abord que :

(3.2.13) $\Delta = \mu_{\alpha}\,.\,\delta_{\alpha\beta}$ commute avec $M(g)^{\Psi}$ pour tout $g\in G$.

En effet, Δ est la matrice de $\oplus\, P_{M_j}$ dans la base $\varphi_{j,l}$ de $\oplus\, D_j$ (cf. la démonstration du lemme 3.2.1), g commute avec $\oplus\, P_{M_j}$ et $M(g)^{\Psi}$ est la matrice de g dans la base $\varphi_{j,l}$.

En particulier, on a :

(3.2.14) $\mu_{j,l} = \mu_{j',l}\quad \forall j = 1, \ldots, N,\quad \forall j' = 1, \ldots, N,\quad \forall l = 1, \ldots, m_1$.

Montrons ensuite que la matrice $(\psi_{\alpha}\mid r_{\beta})$ commute avec $M(g)^{\Psi}$

(3.2.15) $$M(g)^{\Psi}\,.\,((\psi_{\alpha}\mid r_{\beta})) = ((\psi_{\alpha}\mid r_{\beta}))\,.\,M(g)^{\Psi}\,.$$

On remarque que :

$$((\psi_{\alpha}\mid r_{\beta})) = ((\psi_{\alpha}\mid P\psi_{\beta})) - (\psi_{\alpha}\mid \psi_{\beta}))\Delta\,.$$

$M(g)^{\Psi}$ commute avec Δ d'après (3.2.13) et pour les mêmes raisons que pour la démonstration du lemme 3.2.3 (point i)) les matrices :

(3.2.16) $((\psi_{\alpha}\mid P\psi_{\beta}))$ et $((\psi_{\alpha}\mid \psi_{\beta}))$ commutent avec $M^{\Psi}(g)$.

Compte tenu de (2.1.32), on a :

$$(\psi_{\alpha}/r_{\beta}) = w_{\alpha,\beta} + h^2\int \varphi_{\beta}\nabla\chi_{j(\beta)}\varphi_{\alpha}\nabla\chi_{j(\alpha)}dx\,.$$

On montrera donc que :

(3.2.17) $$WM(g)^{\Psi} = M(g)^{\Psi}W$$

si l'on montre, compte tenu de (3.2.15), la même propriété pour la matrice W′ définie par :

$$w'_{\alpha,\beta} = h^2 \int \varphi_\beta \nabla \chi_{j(\beta)} \cdot \varphi_\alpha \nabla \chi_{j(\alpha)} dx$$

c'est-à-dire

$$W' \cdot M(g)^\Psi = M(g)^\Psi \cdot W' .$$

Pour montrer ce dernier point, on remarque tout d'abord que :

. Les 1-formes à coefficients L^2 sur M forment un espace de Hilbert et que G agit canoniquement dans cet espace et de manière unitaire. On note $M^1(g)$ l'action de g dans cet espace.

. Notons maintenant que :

$$M^1(g) \cdot (d\chi_j) = d\chi_{\sigma_g(j)}$$

de sorte que si l'on pose $f_\alpha = \varphi_\alpha d\chi_{j(\alpha)}$, on a :

$$M^1(g) \cdot f_\beta = \sum_\alpha (M(g)^\Psi)_{\alpha,\beta} f_\alpha .$$

On remarque maintenant que, comme pour la démonstration du lemme 3.2.3 :

$$\begin{aligned}(M(g)^\Psi \cdot W')_{\alpha,\beta} &= (M(g)^\Psi \cdot ((f_\gamma \mid f_\beta)))_{\alpha,\beta} \\ &= (M^1(g^{-1}) f_\alpha \mid f_\beta)\end{aligned}$$

et que :

$$(W' \cdot M(g)^\Psi)_{\alpha\beta} = ((f_\alpha f_\gamma)) \cdot M(g)^\Psi)_{\alpha\beta} = (f_\alpha \mid M^1(g) f_\beta)$$

et l'on conclut grâce à l'unitarité de $M^1(g)$. ■

On a démontré le :

THÉORÈME 3.2.4. — *(cf. Théorème 2.1.2). On suppose que les puits sont de diamètre 0, que* Ψ *est construit comme au* § *3. La matrice de* $P|_F$ *dans la base orthonormalisée* $\vec{e}$ *est donnée par*

$$\operatorname{diag} \mu_\alpha + \hat{W} + \tilde{\mathcal{O}}(\mathcal{D}'^2 + \mathcal{D}'^3)$$

et chacun des 3 termes apparaissant dans cette décomposition commute avec $M(g)^\Psi$.

Avant d'expliciter plus avant le point de vue « moléculaire », notons que là G-stabilité de $P|_F$ et les propriétés de commutation énoncées dans le théorème 3.2.4, permettent de décomposer F par rapport aux représentations irréductibles de G

$$\mathbb{C} \otimes F = \sum_{\rho \in \hat{G}} F_\rho$$

où
$$F_\rho = \operatorname{Im} P_\rho$$
et P_ρ est le projecteur associé à ρ : $\dfrac{\chi_\rho(e)}{\operatorname{Card} G} \sum_{g \in G} \overline{\chi_\rho}(g) . M(g)^\Psi$.

La matrice de P se diagonalise par blocs relatifs aux différents $F^{(\rho)}$ (non nuls)
$$(\operatorname{diag} \mu_\alpha)^{(\rho)} + \hat{W}^{(\rho)}_{(\alpha,\beta)} + [P_\rho \tilde{G}(\mathscr{D}'^2 + \mathscr{D}'^3) P_\rho]_{\alpha,\beta} .$$
Si $\rho \neq \bar{\rho}$, on peut repasser au réel en considérant l'espace réel $\operatorname{Re} F_\rho$, et la matrice $P|_F$ et son approchée se diagonalise par rapport à cette décomposition *réelle* de F.

3.3. Interaction moléculaire et symétries.

On reprend ici la discussion du §.2.3 en y ajoutant les informations liées à l'existence de symétries.

On reprend toutes les hypothèses faites au §.3.1 mais on suppose qu'on a éventuellement regroupé les puits qu'on note alors avec deux indices (j, k) en molécules $\mathscr{M}_j$ $(j = 1, \dots, q)$. On a alors :

(3.3.1) $$\mathscr{M}_j = \bigcup_k U_{(j,k)} .$$

On suppose *de plus* que la décomposition de $\mathscr{P}$ en molécules est respectée par G :

(3.3.2) $$g . \mathscr{M}_i = \mathscr{M}_{\tilde{\sigma}_g(i)} \quad \text{avec} \quad \tilde{\sigma}_g(i) \in \sigma_q .$$

Compte tenu de (3.3.2) et (3.1.11) on voit que G opère transitivement sur les molécules :

(3.3.3) $$\forall i \neq j \in [1, \dots, q], \quad \exists \tilde{g}_{ij} \in G \quad \text{t.q} \quad \tilde{\sigma}_{g_{ji}}(i) = j$$

et pour tout $i = 1, \dots, q$, on introduit alors naturellement le sous-groupe $\tilde{G}_i$ de G défini par :

(3.3.4) $$\tilde{G}_i = \{ g \in G, g . \mathscr{M}_i = \mathscr{M}_i \} .$$

Si $\tilde{g}_j$ est l'élément $\tilde{g}_{j1}$ dont l'existence est assurée en (3.3.3), on précise le choix de $g_{(j,k)}$ dans (3.2.5) en prenant

(3.3.5) $$g_{(j,k)} = \tilde{g}_j . g_{1,k} .$$

On introduit alors (cf. 3.2.6) pour chaque molécule $\mathscr{M}_j$ l'espace propre approché $E_{j,k}$ associé au puits $U_{j,k}$ engendré par les fonctions propres $\Psi_{j,k,l} = \tilde{g}_j . g_{1,k} . \psi_{1,1,l}$.

Par projection sur F puis par orthonormalisation (cf. 2.10 et 2.44), on obtient une base orthonormale $e_{j,k,l}$ de F et on pose :

$$
(3.3.6) \qquad \begin{cases} \mathrm{F}_{(j,k)} \text{ est l'espace engendré par les } e_{j,k,l}\ (l = 1, \ldots, m_{j,k}) \\ \mathrm{F}_j = \displaystyle\sum_k \mathrm{F}_{j,k}\,. \end{cases}
$$

Rappelons qu'on a introduit aux §.2, 3.1 et 3.2 les matrices

$$
\begin{aligned}
\mathrm{A} &= \text{matrice de } \mathrm{P}\,|_{\mathrm{F}} \text{ dans la base } \vec{e} \text{ (cf. 2.1.38)} \\
\mathrm{C} &= \operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \hat{\mathrm{W}} \\
\mathrm{B} &= \operatorname{diag}(\mu_\alpha) + \hat{\mathrm{W}} + \mathrm{R}' \quad \text{(cf. 2.3.10)}
\end{aligned}
$$

et que ces matrices commutent toutes avec la famille de matrices $\mathrm{M}^{\Psi}(g)(g \in \mathrm{G})$.

Rappelons que $\mathrm{R}' = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2\mathrm{S}_0/h})$ et que $\mathrm{A} - \mathrm{B} = \mathrm{R}'' = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(\tilde{\mathrm{S}}_0+\mathrm{S}_0)/h})$. Pour comprendre l'esprit de ce qui va suivre, précisons que c'est C que nous supposons connue (c. à. d. calculable (cf. §.5, 6 et 7)) et que nous nous intéressons aux valeurs propres de A ou, à défaut, aux écarts séparant les différentes valeurs propres de A avec leur multiplicité. Notre démarche consiste à vérifier les hypothèses de la proposition 2.3.2.

Remarquons tout d'abord que, compte tenu de (3.3.2), on a :

$$
g\,.\,\mathrm{F}_j = \mathrm{F}_{\tilde{\sigma}_g(j)}\,.
$$

En particulier F_1 peut être considéré comme un $\tilde{\mathrm{G}}_1$-espace. Si on introduit les représentations irréductibles de $\tilde{\mathrm{G}}_1$, on obtient (cf. la discussion suivant le théorème 3.2.4) :

$$
(3.3.7) \qquad \tilde{\mathrm{F}}_1 \stackrel{\text{déf}}{\equiv} \mathrm{F}_1 \otimes \mathbb{C} = \sum_{\pi \in \hat{\tilde{\mathrm{G}}}_1} \tilde{\mathrm{F}}_1^{(\pi)} = \sum_{\pi \in \mathcal{I}_1} \tilde{\mathrm{F}}_1^{(\pi)}
$$

où

$$
\mathcal{I}_1 = \{\, \pi \in \hat{\tilde{\mathrm{G}}}_1,\ \tilde{\mathrm{F}}_1^{(\pi)} \neq \{0\}\,\}\,.
$$

Grâce à (3.3.3), on obtient une décomposition analogue pour les espaces F_i (il y a une bijection naturelle entre $\hat{\tilde{\mathrm{G}}}_i$ et $\hat{\tilde{\mathrm{G}}}_j$) :

$$
(3.3.8) \qquad \tilde{\mathrm{F}}_i \stackrel{\text{déf}}{\equiv} \mathrm{F}_i \otimes \mathbb{C} = \sum_{\pi \in \mathcal{I}_1} \tilde{g}_i \tilde{\mathrm{F}}_1^{(\pi)} \stackrel{\text{déf}}{\equiv} \sum_{\pi \in \mathcal{I}_1} \tilde{\mathrm{F}}_i^{(\pi)}\,.
$$

Posons alors :

$$
(3.3.9) \qquad \tilde{\mathrm{F}}^{(\pi)} = \sum_i \tilde{\mathrm{F}}_i^{(\pi)}\,.
$$

On a alors :

$$
(3.3.10) \qquad \tilde{\mathrm{F}} \stackrel{\text{déf}}{\equiv} \mathrm{F} \otimes \mathbb{C} = \sum_{\pi \in \mathcal{I}_1} \tilde{\mathrm{F}}^{(\pi)}
$$

où

(3.3.11) pour chaque π, $\tilde{F}^{(\pi)}$ est un G-espace.

Soit $\mathscr{I}$ le quotient de $\mathscr{I}_1$ par la relation d'équivalence : $\pi \sim \bar{\pi}$; F étant réel, on déduit de (3.3.10) en regroupant les espaces conjugués que :

$$(3.3.12) \qquad F = \sum_{\pi \in \mathscr{I}} F^{(\pi)} \quad \text{où} \quad F^{(\pi)} \text{ est réel}$$

et

$$F^{(\pi)} \otimes \mathbb{C} = \tilde{F}^{(\pi)} + \tilde{F}^{(\bar{\pi})}.$$

Écrivons tout d'abord les matrices A, B, C, $M(g)^{\Psi}$ dans $\mathscr{L}(\tilde{F})$ par blocs moléculaires correspondant à des éléments de $\mathscr{L}(\tilde{F}_j, \tilde{F}_i)$ et remarquons que toutes ces matrices sont réelles.

Considérons alors les matrices $C^{1,1}$ et $B^{1,1}$ ($\in \mathscr{L}(\tilde{F}_1, \tilde{F}_1)$). Il résulte des propriétés de G-invariance de C et B que ces matrices commutent avec $N^1(g) = M^{\Psi}(g)|_{\tilde{F}_1}$ pour $g \in \tilde{G}_1$.

La première hypothèse que nous ferons est :

$$(3.3.13) \quad [H_1] \left\{ \begin{array}{l} \text{Pour tout } \pi \in \mathscr{I}_1, \tilde{F}_1^{(\pi)} \text{ est irréductible comme } \tilde{G}_1\text{-espace} \\ \quad \text{complexe.} \end{array} \right.$$

On déduit immédiatement de (3.3.13) et du fait que $C^{1,1}$ et $B^{1,1}$ sont réelles, les propriétés suivantes :

$$(3.3.14) \qquad (C^{1,1})^{[\pi]} = (C^{1,1})|_{\tilde{F}_1^{(\pi)}} = \lambda_\pi \, \mathrm{Id}$$

$$(3.3.15) \qquad (B^{1,1})^{[\pi]} = (B^{1,1})|_{\tilde{F}_1^{(\pi)}} = \tilde{\lambda}_\pi \, \mathrm{Id}$$

$$(3.3.16) \qquad \lambda_\pi = \lambda_{\bar{\pi}}, \qquad \tilde{\lambda}_\pi = \tilde{\lambda}_{\bar{\pi}}$$

$$(3.3.17) \qquad \tilde{\lambda}_\pi - \lambda_\pi = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}).$$

Introduisons maintenant la deuxième hypothèse :

$$(3.3.18) \quad [H_2] \left\{ \begin{array}{l} \text{Il existe S, } 0 < S < \inf[2S_0, \tilde{S}_0] \text{ t. q. } C^{(1,1)} \text{ admette} \\ \quad \text{des valeurs propres } \pi\text{-simples, fortement séparées de} \\ \quad \text{paramètres S.} \end{array} \right.$$

On entend par là que si $\pi \neq \pi'$ et $\pi \neq \bar{\pi}'$, alors

$$(3.3.19) \qquad |\lambda_\pi - \lambda_{\pi'}|^{-1} \leqslant Ce^{S/h}.$$

Dans nos applications, S sera de la forme $S_0 + \varepsilon$ avec $\varepsilon > 0$ arbitrairement petit. La condition $S < \inf[2S_0, \tilde{S}_0]$ sera vérifiée dès que : $S_0 < \tilde{S}_0$. C'est dans ce cas que l'écriture « moléculaire » est intéressante.

Remarquons également que compte tenu de (3.3.17), on aura également :

$$(3.3.20) \quad \left\{ \begin{array}{l} B^{(1,1)} \text{ admet des valeurs propres } \pi\text{-simples, fortement séparées} \\ \quad \text{de paramètre S.} \end{array} \right.$$

Remarquons maintenant que les hypothèses de G-invariance impliquent que :

(3.3.21) $A^{(i,i)} = A^{(i',i')}$, $B^{(i,i)} = B^{(i',i')}$, $C^{(i,i)} = C^{(i',i')}$ $\forall i$, $\forall i'$

de sorte que le choix d'une base réelle adaptée à la décomposition (3.3.12) et respectant également (3.3.8) permettra de diagonaliser la matrice

(3.3.22) $$B' = \delta_{j,k} B^{j,k} \quad \text{introduite en (2.3.11)}.$$

Dans cette nouvelle base, la matrice transformée de B prendra, en regroupant les vecteurs propres réels de B′ associés à $\pi \in \mathscr{I}$, la forme :

(3.3.23) $$\text{avec} \begin{cases} \tilde{\tilde{B}} = (\tilde{\tilde{B}})_{\pi,\pi' \in \mathscr{I}} \\ \tilde{\tilde{B}}_{\pi,\pi} = \tilde{\lambda}_\pi \,\mathrm{Id} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{S}_0/h}) \\ \tilde{\tilde{B}}_{\pi,\pi'} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{S}_0/h}). \end{cases}$$

Pour chaque $\pi \in \mathscr{I}$, $(\tilde{\tilde{B}})_{\pi,\pi}$ est une matrice qui commute avec l'action de G sur l'espace G-stable $F^{(\pi)}$.

Il résulte de (3.3.20), (3.3.21) et (3.3.23) que toutes les hypothèses de la proposition 2.3.2 sont satisfaites et que, par conséquent, on peut se limiter, modulo

$$\tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0+\tilde{S}_0)/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2\tilde{S}_0-S]/h})$$

à l'étude des différentes matrices $\tilde{\tilde{B}}_{(\pi,\pi)}$.

Malheureusement, $(\tilde{B})_{\pi,\pi}$ n'est pas très bien connue, mais on remarque que :

(3.3.24) $$\tilde{\tilde{B}}_{\pi,\pi} - \tilde{\lambda}_\pi \,\mathrm{Id} = \tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi} - \lambda_\pi \,\mathrm{Id}$$

(où $\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi}$ est le terme correspondant à $\mathscr{L}(F^{(\pi)}, F^{(\pi)})$ dans l'écriture par blocs relatifs à $\pi \in \mathscr{I}$ de C).

Compte tenu de cette remarque, on a les propriétés suivantes :

Il existe une bijection b de $\bigcup_{\pi \in \mathscr{I}} \Sigma(\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi})$ sur le spectre de $P|_F$ t. q.

(3.3.24) $$\begin{cases} b(\lambda) - \lambda = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0+\tilde{S}_0)/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2\tilde{S}_0-S]/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) \\ (b(\lambda) - b(\lambda')) - (\lambda - \lambda') = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0+\tilde{S}_0)/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2\tilde{S}_0-S]/h}) \\ \text{pour} \quad \lambda \in \Sigma(\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi}), \quad \lambda' \in \Sigma(\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi}) \end{cases}$$

où $\Sigma(\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi})$ désigne le spectre de $\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi}$ qui est concentré dans un intervalle de largeur $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/h})$ autour de λ_π. L'imprécision (modulo $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})$)

concernant la détermination de $\tilde{\lambda}_\pi$ peut donc être *éliminée* si on ne s'intéresse qu'aux écarts entre les différentes valeurs propres proches de $\tilde{\lambda}_\pi$, le décalage $(\tilde{\lambda}_\pi - \lambda_\pi)$ étant fixe.

La dernière étape (qui serait la seule dans le cas où on aurait considéré des molécules réduites à des simples puits et où G_1 serait réduit à (e)) consiste à étudier la matrice $\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi}$ ou plutôt $(\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi} - \lambda_\pi \,\mathrm{Id})$ qui possède les propriétés suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi} - \lambda_\pi \,\mathrm{Id} \text{ est symétrique et commute avec l'action de G} \\ \quad \text{restreinte à } F^{(\pi)}. \end{array} \right. \tag{3.3.25}$$

Alors, pour tout $\pi \in \mathscr{I}$ il existe un sous-ensemble K_π de $\hat{G}$ t. q.

$$\mathbb{C} \otimes F^{(\pi)} = \sum_{\rho \in K_{(\pi)}} F_\rho^{(\pi)} \tag{3.3.26}$$

où les $F_\rho^{(\pi)}$ sont des espaces G-stables de type ρ.

On introduit alors l'hypothèse naturelle :

$$[H_3] \left\{ \begin{array}{l} \text{Il existe } S' < \inf(2\tilde{S}_0 - S_0, S_0 + \tilde{S}_0) \text{ tel que pour tout} \\ \quad \pi \in \mathscr{I}, \text{ tout } \rho \in K_{(\pi)}, \text{ la restriction de } (\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi} - \lambda_\pi \,\mathrm{Id}) \text{ à} \\ \quad F_{(\rho)}^{(\pi)} \text{ admet des valeurs propres } \rho\text{-simples et forte-} \\ \quad \text{ment séparées de paramètre } S'. \end{array} \right. \tag{3.3.27}$$

On entend par là que les valeurs propres $\lambda_{\rho,\pi}^\nu$ de $(\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi} - \lambda_\pi \,\mathrm{Id})|_{F_{(\rho)}^{(\pi)}}$ sont de multiplicité d_ρ où d_ρ est le degré de la représentation irréductible ρ et que :

$$|\lambda_{\rho,\pi}^\nu - \lambda_{\rho,\pi}^{\nu'}|^{-1} \leqslant C \,.\, e^{S'/h} \qquad \text{pour} \quad \nu \neq \nu' . \tag{3.3.28}$$

Dans les applications, $S' = \tilde{S}_0 + \varepsilon$ avec $\varepsilon > 0$ arbitrairement petit de sorte que l'inégalité sur S' est bien vérifiée.

On a finalement démontré le :

THÉORÈME 3.3.1. — *Sous les hypothèses* $[H_1]$, $[H_2]$, $[H_3]$, *il existe une bijection b de* $\cup\, \Sigma(\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi})$ *sur le spectre de* A *telle que* :

$$b(\lambda) - \lambda = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0 + \tilde{S}_0)/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2\tilde{S}_0 - S]/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) .$$

De plus, la restriction de b à $(\tilde{\tilde{C}}_{\pi,\pi})$ *vérifie* :

$$b(\lambda) - b(\lambda') - (\lambda - \lambda') = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0 + \tilde{S}_0)/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2\tilde{S}_0 - S]/h}) .$$

Le spectre de A *se décompose sous la forme* :

$$\Sigma(A) = \bigcup_{\pi \in \mathscr{I}} \sigma_\pi$$

avec $d(\sigma_\pi, \sigma_{\pi'})^{-1} \leqslant C \,.\, e^{S/h}$ *avec* $S < \inf [2S_0, \tilde{S}_0]$ *et*

$$\sigma_\pi = \bigcup_{\rho \in K_\pi, \rho \sim \bar{\rho}} \sigma_\pi^\rho$$

Les valeurs propres de σ_π^ρ *sont de multiplicité* $2d_\rho$ *si* $\rho \neq \bar{\rho}$, d_ρ *si* $\rho = \bar{\rho}$ *et vérifient :*

$$|\lambda_{\rho,\pi}^{\nu}(A) - \lambda_{\rho,\pi}^{\nu'}(A)|^{-1} \leqslant C e^{S'/h} \qquad \textit{avec} \qquad S' < \inf [2\tilde{S}_0 - S, S_0 + \tilde{S}_0]$$

et sont déterminées à une translation « inconnue » de $(\tilde{\lambda}_\pi - \lambda_\pi)$ *près par les valeurs propres de* $\tilde{\tilde{C}}_{(\pi,\pi)}$ *modulo*

$$\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0 + \tilde{S}_0/h}) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(2\tilde{S}_0 - S)/h}).$$

La vérification des hypothèses $[H_1]$, $[H_2]$, $[H_3]$ se ramène à :

(1) Une étude de l'action de G sur les molécules (hypothèse $[H_1]$) et à

(2) Une étude fine de la matrice C et plus particulièrement de $C_{1,1}$ et de $\tilde{\tilde{C}}_{(\pi,\pi)}$.

Nous montrerons aux § suivants comment on peut apporter une réponse satisfaisante à ces questions pour de nombreux exemples.

§.4. PREMIERS EXEMPLES D'APPLICATIONS

Ce paragraphe est une relecture du §.3 sur deux types d'exemples.

4.1. Cas des puits simples.

On se place dans le cadre du §.3, mais on suppose de plus que :

(4.1.1) $\left\{ \right.$ $U_j = \{ x_j \}$ est un puits simple non dégénéré ($V''(x_j)$ défini positif) ($j = 1, \ldots, q$).

(4.1.2) $\left\{ \right.$ On peut choisir $I(h)$ de telle sorte que $P_{M_1}(h)$ contienne une unique valeur propre que l'on note $\mu(h)$.

E_1, introduit en (3.2.3), est un espace de dimension 1. On suppose maintenant que :

(4.1.3) $\qquad G_1$ agit trivialement sur E_1.

REMARQUE 4.1.1. — (4.1.3) est vérifiée dans les 2 cas suivants :

(4.1.4) $\qquad G_1 = \{ e \}$

ou

(4.1.5) $\mu(h)$ est la première valeur propre de $P_{M_1}(h)$.

Il résulte en effet de la positivité de la première fonction propre ϕ (cf. [16]) que, comme pour tout $g \in G_1$ on a $g\phi = \pm \phi$, on a nécessairement :

$$g\phi = \phi . \qquad \blacksquare$$

Il résulte alors immédiatement de (3.2.8) que la matrice $M^{\Psi}(g)$ est alors la matrice de la permutation σ_g définie en (3.1.6)

$$(4.1.6) \qquad (M^{\Psi}(g))_{i,j} = \delta_{i,\sigma_g(j)} .$$

La propriété de commutation d'une matrice symétrique P avec $M^{\Psi}(g)$ se traduit ici par :

$$(4.1.7) \qquad p_{i,j} = p_{\sigma_g(i),\sigma_g(j)}, \qquad \forall g \in G$$

et en particulier, sous l'hypothèse (3.1.5) :

$$(4.1.8) \qquad p_{i,i} = p_{j,j}, \qquad \forall i, \qquad \forall j .$$

On va considérer maintenant 2 cas particuliers :

CAS α). *Le groupe* G *agit transitivement sur l'espace des arêtes non orientées* c. à d.

$$(4.1.9) \qquad \begin{cases} \forall i,j, \quad i \neq j, \quad \forall i',j', \quad i' \neq j', \quad \exists g \in G \quad \text{t.q} \\ \sigma_g(i) = i', \quad \sigma_g(i) = j' \quad \text{ou} \quad \sigma_g(i) = j', \quad \sigma_g(j) = i' . \end{cases}$$

Dans ce cas, les matrices $P = (p_{i,j})$ sont de la forme :

$$P = \mu(P)I + \alpha(P)\begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \ddots & & 1 \\ \vdots & & 0 & \vdots \\ 1 & & \ddots & 1 \\ 1 & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

i. e.

$$(4.1.10) \qquad p_{i,j} = \mu(P)\delta_{i,j} + \alpha(P)[1 - \delta_{i,j}] .$$

Si $\alpha(P) \neq 0$, les valeurs propres de P sont :

$$(4.1.11) \qquad \begin{matrix} \mu(P) + \alpha(P)(q-1) & \text{multiplicité } 1 \\ \mu(P) - \alpha(P) & \text{multiplicité } (q-1) . \end{matrix} \qquad \blacksquare$$

CAS β). — *L'image de* G *par* $g \to \sigma_g$ *est le sous-groupe des permutations circulaires.*

Dans ce cas, les matrices $P = (p_{i,j})$ sont de la forme :

$$P = \mu(P)I + \sum_{i=1}^{[q/2]} \alpha_i(P)[\mathcal{S}^i + \mathcal{S}^{-i}] \tag{4.1.13}$$

$$\text{avec} \quad \mathcal{S} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ 1 & & & 0 \end{pmatrix}$$

Par ailleurs, les valeurs propres de $\mathcal{S}$ sont les racines $q^{\text{ième}}$ de l'unité $\omega_q^l \, (l = 0, \dots, q-1)$. Les valeurs propres de P sont par conséquent :

$$\mu(P)+\lambda^l(P)=\mu(P)+\sum_{i=1}^{[q/2]} \alpha_i(P)[(\omega_q^l)^i + (\omega_q^l)^{-i}] \quad l=0, \dots, q-1 . \quad \blacksquare \tag{4.1.14}$$

On obtient alors les théorèmes suivants :

THÉORÈME 4.1.2. — *Sous les hypothèses du théorème 3.2.4, les hypothèses (4.1.1), (4.1.2), (4.1.3) et (4.1.9), les valeurs propres de* $P|_F$ *sont de la forme* :

$$\begin{cases} \tilde{\mu}(h) + \tilde{\alpha}(W)(q-1) & (\textit{multiplicité } 1) \\ \tilde{\mu}(h) - \tilde{\alpha}(W) & (\textit{multiplicité } (q-1)) \end{cases} \tag{4.1.15}$$

avec

$$\begin{cases} \tilde{\mu}(h) - \mu(h) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) \\ \tilde{\alpha}(W) = \hat{\omega}_{1,2}(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) . \end{cases}$$

De plus si :

$$|\hat{\omega}_{1,2}(h)| \geqslant e^{-\frac{S_0}{h}-\frac{\varepsilon}{h}} \tag{4.1.17}$$

hypothèse qui sera souvent vérifiée (cf. §.6 et théorème 6.6 de [11]), on a exactement 2 valeurs propres distinctes.

THÉORÈME 4.1.3. — *Sous les hypothèses du théorème 3.2.4, les hypothèses (4.1.1), (4.1.2), (4.1.3) et (4.1.13), les valeurs propres de* $P|_F$ *sont de la forme* :

$$\tilde{\mu}(h) + \sum_{i=1}^{[q/2]} \tilde{\alpha}_i(W)[(\omega_q^l)^i + (\omega_q^l)^{-i}] \qquad l = 0, \dots, q \tag{4.1.18}$$

avec

$$\begin{cases} \tilde{\mu}(h) - \mu(h) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) \\ \tilde{\alpha}_i(W) = \hat{\omega}_{1,i}(h) + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) . \end{cases} \tag{4.1.19}$$

Sauf relations accidentelles entre les $\tilde{\alpha}_i$, on a donc génériquement :

si q est pair, *2 racines simples et* $\dfrac{q-2}{2}$ *doubles*

si q est impair, *1 racine simple et* $\dfrac{q-1}{2}$ *doubles.*

REMARQUE 4.1.4. — On est bien dans le cas générique si, par exemple, on a l'hypothèse (4.1.17) et :

(4.1.20) $d(x_i, x_j) > S_0$ si $|i-j| \neq 0, 1 \pmod q$.

Posant $\sigma' = \inf\limits_{\substack{|i-j|\neq 0,1 \\ (\mathrm{mod}\ q)}} d(x_i, x_j)$, on obtient alors les valeurs propres de la forme :

(4.1.21) $$\mu(h) + \delta \hat{w}_{1,2}\left[2 \cos\left[\frac{2\pi l}{q}\right]\right] (\mathrm{mod}\ \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\inf(\sigma', 2S_0)/h}))$$

$$\left(\delta = 1, \quad \text{si} \quad q > 2, \quad \delta = \frac{1}{2} \quad \text{si} \quad q = 2\right)$$

les multiplicités étant celles *données* par les termes principaux. ■

EXEMPLE 4.1.5. — L'exemple le plus simple est le cas de $h^2 \dfrac{d^2}{d\theta^2} + V(\theta)$ sur le cercle de longueur (2π) où V admet des puits non dégénérés aux points $\dfrac{(2\pi)l}{q}$ $(l = 0, \ldots, q-1)$ et vérifie de plus :

$$V\left(\theta + \frac{2\pi}{q}\right) = V(\theta), \qquad \forall \theta \in S^1 .$$

Alors d'après le §.1, toutes les hypothèses du théorème (4.1.3) et de la remarque 4.1.4 sont vérifiées et on peut expliciter $\hat{w}_{1,2}$. Notons toutefois que dans le cas particulier $q = 2$, il y a 2 géodésiques minimales joignant les 2 puits, ce qui multiplie par 2 l'interaction.

On reviendra sur cet exemple au §.7.1.

4.2. **Un exemple d'interaction entre les molécules** (*).

Cet exemple n'est pas motivé par la physique ou la chimie (encore qu'on peut espérer qu'un dérivé du Carbone corresponde à cette symétrie !) mais il nous semble significatif pour illustrer le phénomène d'interaction et la précision de nos résultats.

(*) Nous remercions A. Grigis pour d'utiles conversations sur cet exemple.

4.2.1. *Description de* G.

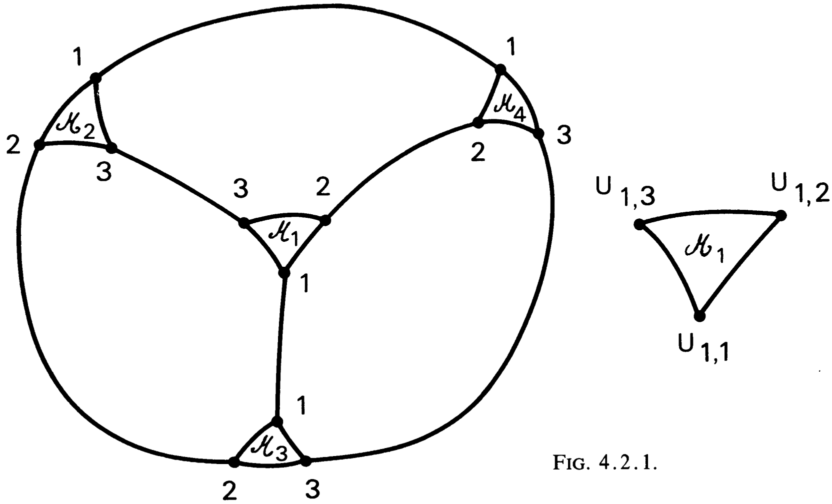


FIG. 4.2.1.

Conformément à la figure, on suppose que l'on a 4 molécules :

(4.2.0) $\mathcal{M}_1$, $\mathcal{M}_2$, $\mathcal{M}_3$ et $\mathcal{M}_4$ composées chacune de 3 puits $U_{i,1}$, $U_{i,2}$, $U_{i,3}$ réduits à un point et non dégénérés.

Plutôt que de décrire complètement le groupe de symétrie de notre système de molécules, on se contente de décrire son empreinte sur les puits i. e. le sous-groupe de σ_{12} image de G par $g \to \sigma_g$ où $\sigma_g(i,j)$ est défini par :

(4.2.1) $$g \, . \, U_{i,j} = U_{\sigma_g(i,j)} \, .$$

On note σ_{12} ce sous-groupe et on suppose que :

(4.2.2) *Hypothèse* : σ_{12} est le sous-groupe de σ_{12} engendré par les 2 éléments suivants :

$$j_1 \left\{ \begin{array}{l} j_1[1,1] = (1,2) \\ j_1[1,2] = (1,3) \\ j_1[1,3] = (1,1) \\ j_1(2,1) = (3,2) \\ j_1(2,2) = (3,3) \\ j_1(2,3) = (3,1) \\ j_1(3,1) = (4,2) \\ j_1(3,2) = (4,3) \\ j_1(3,3) = (4,1) \\ j_1(4,1) = (2,2) \\ j_1(4,2) = (2,3) \\ j_1(4,3) = (2,1) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \left(\begin{array}{l} \text{pour la molécule } \mathcal{M}_1 \\ \text{(rotation de } 2\pi/3) \end{array} \right) \\ \\ \left(\begin{array}{l} \text{La molécule } \mathcal{M}_2 \text{ est envoyée sur la molécule } \mathcal{M}_3 \\ \text{avec une rotation de } 2\pi/3 \end{array} \right) \end{array}$$

j_1 permute circulairement les molécules 2, 3, 4 et fait tourner les 3 puits de chaque molécule de $2\pi/3$.

De même, on définit j_2 en permutant circulairement les molécules (3, 1, 4) et en faisant tourner les 3 puits de chaque molécule de $\pi/3$.

On vérifie, qu'on définit ainsi un groupe de 12 éléments :

$$e, j_1, j_1^2, j_2, j_2^2, j_3, j_3^2, j_4, j_4^2, \alpha_{1,2}, \alpha_{1,3}, \alpha_{1,4}$$

pour lequel on a la table de multiplication suivante que nous donnons à titre de curiosité :

	e	j_1	j_1^2	j_2	j_2^2	j_3	j_3^2	j_4	j_4^2	$\alpha_{1,2}$	$\alpha_{1,3}$	$\alpha_{1,4}$
e	e	j_1	j_1^2	j_2	j_2^2	j_3	j_3^2	j_4	j_4^2	$\alpha_{1,2}$	$\alpha_{1,3}$	$\alpha_{1,4}$
j_1	j_1	j_1^2	e	j_4^2	$\alpha_{1,4}$	j_2^2	$\alpha_{1,2}$	j_3^2	$\alpha_{1,3}$	j_4	j_2	j_3
j_1^2	j_1^2	e	j_1	$\alpha_{1,3}$	j_3	$\alpha_{1,4}$	j_4	$\alpha_{1,2}$	j_2	j_3^2	j_4^2	j_2^2
j_2	j_2	j_3^2	$\alpha_{1,4}$	j_2^2	e	j_4^2	$\alpha_{1,3}$	j_1^2	$\alpha_{1,2}$	j_3	j_1	j_4
j_2^2	j_2^2	$\alpha_{1,3}$	j_4	e	j_2	$\alpha_{1,2}$	j_1	$\alpha_{1,4}$	j_3	j_4^2	j_3^2	j_1^2
j_3	j_3	j_4^2	$\alpha_{1,2}$	j_1^2	$\alpha_{1,3}$	j_3^2	e	j_2^2	$\alpha_{1,4}$	j_2	j_4	j_1
j_3^2	j_3^2	$\alpha_{1,4}$	j_2	$\alpha_{1,2}$	j_4	e	j_3	$\alpha_{1,3}$	j_1	j_1^2	j_2^2	j_4^2
j_4	j_4	j_2^2	$\alpha_{1,3}$	j_3^2	$\alpha_{1,2}$	j_1^2	$\alpha_{1,4}$	j_4^2	e	j_1	j_3	j_2
j_4^2	j_4^2	$\alpha_{1,2}$	j_3	$\alpha_{1,4}$	j_1	$\alpha_{1,3}$	j_2	e	j_4	j_2^2	j_1^2	j_3^2
$\alpha_{1,2}$	$\alpha_{1,2}$	j_3	j_4^2	j_4	j_3^2	j_1	j_2^2	j_2	j_1^2	e	$\alpha_{1,4}$	$\alpha_{1,3}$
$\alpha_{1,3}$	$\alpha_{1,3}$	j_4	j_2^2	j_3	j_1^2	j_2	j_4^2	j_1	j_3^2	$\alpha_{1,4}$	e	$\alpha_{1,2}$
$\alpha_{1,4}$	$\alpha_{1,4}$	j_2	j_3^2	j_1	j_4^2	j_4	j_1^2	j_3	j_2^2	$\alpha_{1,3}$	$\alpha_{1,2}$	e

Ce groupe admet 4 représentations irréductibles :

i) ρ_1 t. q. $d_{\rho_1} = 1$ (représentation triviale)

(4.2.3) $\rho_1(e) = 1, \qquad \rho_1(j_1) = 1, \qquad \rho_1(j_2) = 1\,.$

ii) ρ_2 t. q. $d_{\rho_2} = 1$

(4.2.4) $$\rho_2(e) = 1, \qquad \rho_2(j_1) = e^{2i\pi/3}, \qquad \rho_2(j_2) = e^{2i\pi/3}.$$

iii) ρ_3 t. q. $d_{\rho_3} = 1$

(4.2.5) $$\rho_3(e) = 1, \qquad \rho_3(j_1) = e^{4i\pi/3}, \qquad \rho_3(j_2) = e^{4i\pi/3}.$$

Notons que :

(4.2.6) $$\rho_3 = \overline{\rho_2}$$

iv) ρ_4 t. q. $d_{\rho_4} = 3$.

Dans $\mathbb{R}^3$, on a :

(4.2.7) $$\rho_4(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \rho_4(j_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\rho_4(j_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Son caractère χ_{ρ_4} vérifie :

(4.2.8)

e	j_1	j_1^2	j_2	j_2^2	j_3	j_3^2	j_4	j_4^2	α_{12}	α_{13}	α_{14}
3	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-1	-1

On a bien la relation classique [*17*] :

(4.2.9) $$\sum_{\rho \in \hat{\sigma}^{12}} n_\rho^2 = 1 + 1 + 1 + (3)^2 = 12 = \operatorname{card} \sigma_{12}.$$

Comme on l'a déjà dit σ_{12} n'est que l'image de G par l'homomorphisme $g \to \sigma_g$; on supposera toutefois dans la suite (quitte à passer au quotient et à perdre ainsi quelques informations) que :

(4.2.10) $$G \approx \sigma_{12}.$$

4.2.2. *Action de* G *sur les espaces approchés.*

On fait maintenant l'hypothèse :

(4.2.11) On peut choisir l'intervalle I(h) de sorte qu'il ne contienne qu'une valeur propre $\mu(h)$ du problème de Dirichlet associé au puits $U_{1,1}$.

L'espace approché est construit selon la procédure décrite au § .3. Si $\varphi_{1,1}$

désigne la fonction propre normalisée du problème de Dirichlet associé à $U_{1,1}$, $\varphi_{i,j}$ associée au puits $U_{i,j}$ sera défini par :

(4.2.12) $$\varphi_{1,2} = j_1 \cdot \varphi_{1,1}, \qquad \varphi_{1,3} = j_1^2 \cdot \varphi_{1,1}$$

puis, par exemple pour passer à la molécule 4, on pose :

(4.2.13) $$\varphi_{4,2} = j_2 \cdot \varphi_{1,1}, \quad \varphi_{4,3} = j_2 \cdot \varphi_{1,2}, \quad \varphi_{4,1} = j_2 \cdot \varphi_{1,3} \quad \text{etc.} \ldots$$

Par ailleurs, on voit facilement que le sous-groupe de $G (= \sigma_{12})$ qui conserve un puits donné est réduit à $\{e\}$. Il n'y a par conséquent pas d'arbitraire dans notre choix des $\varphi_{i,j}$. On définit ainsi facilement les espaces $E_{j,k}$ et E_j.

L'étape suivante est de déterminer les matrices $M^{\psi}(g)$ dans la base adaptée. Compte tenu du fait que j_1 et j_2 engendrent le groupe G, il suffit de calculer :

(4.2.14)
$$\mathscr{I}_1 = M^{\psi}(j_1) = \begin{pmatrix} R & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R \\ 0 & R & 0 & 0 \\ 0 & 0 & R & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{où} \qquad R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
$$\mathscr{I}_1 = M^{\psi}(j_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & R & 0 \\ 0 & R & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R \\ R & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

En fait, on reconnaît facilement que, dans la base adaptée, $g \to M^{\psi}(g)$ correspond à la représentation *régulière* de σ_{12} dans $\mathbb{R}^{12}$.

La théorie générale des groupes finis (cf. [*17*]) nous dit alors que $E^{\mathbb{C}}$ ou $F^{\mathbb{C}}$, identifiés par le choix de la base adaptée à $\mathbb{C}^{12}$, admette les décompositions

(4.2.15) $$\mathbb{C}^{12} \approx F^{\mathbb{C}} = F^{\mathbb{C}}_{\rho_1} \oplus F^{\mathbb{C}}_{\rho_2} \oplus F^{\mathbb{C}}_{\rho_3} \oplus 3\, F^{\mathbb{C}}_{\rho_4}$$

Se rappelant que $\rho_2 = \overline{\rho_3}$, on obtient la décomposition de F (ou E)

(4.2.16) $$\mathbb{R}^{12} \approx F = F_{\rho_1} \oplus F_{\rho_2,\overline{\rho_2}} \oplus 3\, F_{\rho_4}$$

où F_{ρ_1} est irréductible de dimension 1
F_{ρ_2,ρ_2} est irréductible sur $\mathbb{R}$ de dimension 2
F_{ρ_4} est irréductible de dimension 3.

Calculons maintenant les différents espaces ; on les obtient en décomposant $\mathbb{C}^{12}$ en espaces G-stables de plus en plus petits.

On peut d'abord décomposer $\mathbb{C}^{12}$ sous la forme :

$$\mathbb{C}^{12} = F^{(1)(\mathbb{C})} + F^{(2)(\mathbb{C})} \tag{4.2.17}$$

avec
$$F^{(1)} \perp F^{(2)}$$

et
$$F^{(1)} = (X, X, X, X), \qquad X \in \mathbb{C}^3 .$$

Examinons tout d'abord la restriction de $M^{\psi}(g)$ à l'espace $F^{(1)}$. On a :

$$J_1 \begin{pmatrix} X \\ X \\ X \\ X \end{pmatrix} = J_2 \begin{pmatrix} X \\ X \\ X \\ X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} RX \\ RX \\ RX \\ RX \end{pmatrix} \tag{4.2.18}$$

Les vecteurs propres de R fournissent alors la décomposition de $F^{(1)(\mathbb{C})}$:

$$F^{(1)(\mathbb{C})} = F^{\mathbb{C}}_{\rho_1} \oplus F^{\mathbb{C}}_{\rho_2} \oplus F^{\mathbb{C}}_{\rho_3} \tag{4.2.19}$$

où $\quad F_{\rho_l} = \{ (X_l, X_l, X_l, X_l ; RX_l = e^{2i\pi(l-1)/3} X_l \} \qquad l = 1, 2, 3 .$

L'espace $F^{(2)}$ est un espace de type (ρ_4) de dimension 9 qui n'admet pas *a priori* de décomposition canonique.

Nous reviendrons ultérieurement à la décomposition de $F^{(2)}$.

4.2.3. *Propriétés des valeurs propres de* C *ou de* $\hat{W}$.

Soit D une matrice symétrique réelle commutant avec J_1 et $\mathscr{I}_2$; un petit calcul montre que D est de la forme :

$$D = \begin{pmatrix} \delta & \alpha & R\alpha R^{-1} & R^2\alpha R^{-2} \\ \alpha & \delta & R^2\alpha R^{-2} & R\alpha R^{-1} \\ R\alpha R^{-1} & R^2\alpha R^{-2} & \delta & \alpha \\ R^2\alpha R^{-2} & R\alpha R^{-1} & \alpha & \delta \end{pmatrix} . \tag{4.2.20}$$

où δ et α sont des matrices 3×3 symétriques, réelles et où : $\delta R = R\delta$.

Calculons la restriction de D à $F^{(1)}$; on a :

$$D\,|_{F^{(1)}} = \delta + \alpha + R\alpha R^{-1} + R^2\alpha R^{-2} \tag{4.2.21}$$

(en identifiant $F^{(1)}$ à $\mathbb{C}^3$ par la projection $(X, X, X, X) \to X$).

On a également :

$$M^{\psi}(j_1)\,|_{F^{(1)}} = M^{\psi}(j_2)\,|_{F^{(2)}} = R . \tag{4.2.22}$$

(4.2.23) $\left\{\begin{array}{l}\text{Cette matrice } D\,|_{F^{(1)}} \text{ admet donc une valeur propre simple cor-}\\ \text{respondant à } D\,|_{F_{\rho_1}} \text{ et une valeur propre double correspondant}\\ \text{à } F_{\rho_2}+F_{\rho_2}\text{, ces deux valeurs pouvant être accidentellement}\\ \text{confondues.}\end{array}\right.$

Il nous reste à étudier la restriction de D à $F^{(2)}$. La théorie générale nous dit que l'on a 3 valeurs propres triples pouvant être « accidentellement » confondues.

Notons, pour raccourcir la discussion qui va suivre, que :

$$A_{1,2} = M^{\psi}(\alpha_{1,2}) = \begin{pmatrix} 0 & I & & \\ I & 0 & & \bigcirc \\ & & 0 & I \\ \bigcirc & & I & 0 \end{pmatrix} \tag{4.2.24}$$

$A_{1,2}$ a la propriété d'être symétrique et admet comme vecteurs propres les vecteurs de la forme :

$$\begin{array}{lll} (e, e, e, e) & \in F^{(1)} & \\ (e, e, -e, -e) & \text{valeur propre } +1, & e \in \mathbb{R}^3 \\ (f, -f, f, -f) & \text{valeur propre } -1, & f \in \mathbb{R}^3 \\ (g, -g, -g, g) & \text{valeur propre } -1, & g \in \mathbb{R}^3 . \end{array}$$

Si $F^{(2)}_{\{1\}}$ désigne l'intersection de $F^{(2)}$ et de l'espace propre de $A_{1,2}$ correspondant à la valeur propre $+1$, il résulte de la commutation de D et $A_{1,2}$ que $F^{(2)}_{\{1\}}$ est stable par D.

Alors $D\,|_{F^{(2)}_{\{1\}}} = \delta + \alpha - R\alpha R^{-1} - R^2\alpha R^{-2}$.

(4.2.25) $\left\{\begin{array}{l}\text{Si } e_i\,(i = 1, 2, 3) \text{ est un vecteur propre de la matrice :}\\ \qquad\qquad \delta = \alpha - R\alpha R^{-1} - R^2\alpha R^{-2} \\ \text{alors} \\ \qquad\qquad v_i = (e_i, e_i, -e_i, -e_i) \\ \text{est un vecteur propre de D.}\end{array}\right.$

Pour terminer cette discussion, on note que :

(4.2.26) $\left\{\begin{array}{l}\mathscr{I}_1 v_i = \mathscr{I}_1(e_i, e_i, -e_i, -e_i) = (Re_i, -Re_i, Re_i, -Re_i)\\ \text{et}\\ \mathscr{I}_1^2 v_i = \mathscr{I}_1^2(e_i, e_i, -e_i, -e_i) = (R^2e_i, -R^2e_i, -R^2e_i, R^2e_i)\\ \text{sont des vecteurs propres indépendants.}\end{array}\right.$

On a donc obtenu une décomposition naturelle de $F^{(2)}$ diagonalisant D en 3 espaces irréductibles de type ρ_4 :

(4.2.27) $F^{(2)(i)} = \{$ espace engendré par $v_i,\ J_1 v_i,\ J_1^2 v_i \}$ $\quad i = 1, \ldots, 3$

où v_i est défini en (4.2.25).

L'étude des valeurs propres de D se ramène donc à celle des matrices :

$$(D_1) = \delta + \alpha + R\alpha R^{-1} + R^2\alpha R^{-2}$$

et

$$(D_2) = \delta + \alpha - R\alpha R^{-1} - R^2\alpha R^{-1}.$$

De plus si les racines de D_2 sont distinctes (hypothèses de ρ-simplicité), les multiplicités pour chaque valeur de ρ de $D|_{F(\rho)}$ sont stables par petite perturbation.

Les résultats précédents s'appliquent naturellement à C et W que nous allons maintenant calculer.

Matrice $\delta(W)$.

$\delta(W)$ n'est autre que la matrice $W^{1,1}$ dans la notation « moléculaire ». $\delta(W)$ commutant avec R et ses termes diagonaux étant nuls, on a :

(4.2.28) $$\delta(W) = \begin{pmatrix} 0 & a & a \\ a & 0 & a \\ a & a & 0 \end{pmatrix}$$

avec $$a = h^2 \int \nabla\chi_{1,2} \cdot \chi_{1,1}(\varphi_{1,2}\nabla\varphi_{1,1} - \varphi_{1,1}\nabla\varphi_{1,2})dx$$

$\delta(W)$ admet une valeur propre simple $\lambda_\delta = 2a$
une valeur propre double $\lambda_\delta = -a$.

L'hypothèse $[H_1]$ est clairement satisfaite (cf. §.3 (3.3.13)); l'hypothèse $[H_2]$(cf. (3.3.18)) sera satisfaite sous la condition suivante (génériquement vérifiée)

(4.2.29) $\forall\varepsilon > 0, \quad |a| \geqslant e^{-S_0/h} . e^{-\varepsilon/h}$ pour h assez petit $< h_0(\varepsilon)$

(cette condition apparaissait déjà en (4.1.17)).

En fait l'hypothèse $[H_2]$ concernait la matrice $\mu(h)\mathrm{Id} + W^{1,1}$ mais bien entendu la condition reste la même.

Matrice $\alpha(W)$.

On a :

(4.2.30) $$\alpha(W)_{i,j} = h^2 \int \nabla\chi_{2,j} \cdot \chi_{1,i}(\varphi_{1,i}\nabla\varphi_{2,j} - \varphi_{2,j} . \nabla\varphi_{1,i})dx.$$

Ce terme est de l'ordre de $\tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{d(U_{1,i},U_{2,j})}{h}}\right)$.

Si on fait l'hypothèse simplificatrice suivante

$$(4.2.31) \qquad d[\mathrm{U}_{1,i}, \mathrm{U}_{2,j}] > d(\mathrm{U}_{1,3}, \mathrm{U}_{2,3}) \quad \text{si} \quad (i,j) \neq (3,3)$$

et on pose :

$$(4.2.32) \qquad \tilde{\tilde{\mathrm{S}}}_0 = \inf_{(i,j)\neq(3,3)} d(\mathrm{U}_{1,i}, \mathrm{U}_{2,j}).$$

On en déduit que :

$$(4.2.33) \qquad \alpha(\mathrm{W})_{i,j} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \qquad (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{\mathrm{S}}}_0/h})).$$

On est conduit à l'analogue de la condition (4.2.29) qui a les mêmes bonnes raisons d'être génériquement vérifiée :

$$(4.2.34) \quad \forall\varepsilon > 0, \qquad |b| \geqslant e^{-\tilde{\mathrm{S}}_0/h - \varepsilon/h} \qquad \text{pour} \qquad h < h_0(\varepsilon)\,(> 0)$$

où $\tilde{\mathrm{S}}_0 = d(\mathrm{U}_{1,3}, \mathrm{U}_{2,3})$.

Calcul de $\mathrm{D}_1(\mathrm{W})$.

On voit facilement que :

$$(4.2.35) \qquad \mathrm{D}_1(\mathrm{W}) = \begin{pmatrix} b & a & a \\ a & b & a \\ a & a & b \end{pmatrix} \qquad \text{modulo } \mathcal{O}(e^{-\tilde{\mathrm{S}}_0/h})$$

et que les valeurs propres sont :

$$\lambda_1(\mathrm{D}_1(\mathrm{W})) \equiv 2a + b \quad (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{\mathrm{S}}}_0/h})) \text{ multiplicité } 1$$

$$\lambda_2(\mathrm{D}_1(\mathrm{W})) \equiv -a+b \quad (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{\mathrm{S}}}_0/h})) \text{ multiplicité } 2.$$

(Rappelons que $\equiv$ n'affecte ni les séparations observées, ni les multiplicités).

INTERPRÉTATION 4.2.3.1. — Si on désigne par π_1 la représentation irréductible triviale de $\tilde{\mathrm{G}}_1$ et par π_2 la représentation irréductible (sur les espaces réels) de dimension 2 de G_1

$$(4.2.36) \quad \begin{cases} \lambda_1(\mathrm{D}_1) - 2a \text{ correspond à la valeur propre } \lambda_{\rho_1,\pi_1} \\ (\lambda_2(\mathrm{D}_1) + a) \text{ correspond à la valeur propre } \lambda_{\rho_2,\pi_2} = \lambda_{\overline{\rho_2},\pi_2}. \end{cases}$$

Calcul de $D_2(W)$.

Un calcul simple montre que :

$$(4.2.37)\qquad D_2(W) = \begin{pmatrix} -b & a & a \\ a & -b & a \\ a & a & b \end{pmatrix} \quad (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{S}}_0/h}))$$

et que ces valeurs propres sont :

$$(4.2.38)\qquad \begin{cases} \lambda_1(D_2(W)) \equiv -a-b & (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{S}}_0/h})) \\ \lambda_2(D_2(W)) \equiv -a+b/3 & (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\inf[2\tilde{S}_0-S_0,\tilde{\tilde{S}}_0]/h})) \\ \lambda_3(D_2(W)) \equiv 2a-b/3 & (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\inf[2\tilde{S}_0-S_0,\tilde{\tilde{S}}_0]/h})). \end{cases}$$

Sous l'hypothèse :

$$(4.2.39)\qquad \tilde{S}_0 > S_0$$

le terme modulo est négligeable par rapport à a et b.

INTERPRÉTATION 4.2.3.2. — (4.2.40) $\lambda_3(D_2)$-$2a$ correspond à la valeur propre triple λ_{ρ_4,π_1} tandis que :

$$(4.2.41)\qquad \begin{cases} \lambda_1(D_2) + a \text{ et } \lambda_2(D_2) + a \text{ correspondent à 2 valeurs propres} \\ \quad\text{triples } \lambda^1_{\rho_4,\pi_2} \text{ et } \lambda^2_{\rho_4,\pi_2}. \end{cases}$$

Nous sommes maintenant en mesure de vérifier les hypothèses $[H_3]$ introduites en (3.3.27), elles se déduisent facilement des points (4.2.34) à (4.2.41).

On est donc en mesure d'appliquer le théorème 3.3.1 qui devient, en remarquant que $\tilde{\tilde{S}}_0 \leqslant S_0 + \tilde{S}_0$:

PROPOSITION 4.2.3.3. — *Sous les hypothèses du §.4.2.1 et les hypothèses (4.2.29), (4.2.31), (4.2.34) et (4.2.39), alors il existe $\tilde{a}$ t.q. : $\tilde{a} - a = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})$ et t.q. les valeurs propres de $P|_F$ soient avec les multiplicités indiquées* :

$\lambda_1 = \mu(h) + 2\tilde{a} + b$ (*modulo* $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{S}}_0/h})$) (*racine simple*)

$\lambda_2 = \mu(h)+2\tilde{a} - b/3$ (*modulo* $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\inf[\tilde{\tilde{S}}_0,2\tilde{S}_0-S_0]/h})$) (*racine triple*)

$\lambda_3 = \mu(h) - \tilde{a} + b$ (*modulo* $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{S}}_0/h})$) (*racine double*)

$\lambda_4 = \mu(h) - \tilde{a} - b$ (*modulo* $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\inf[\tilde{\tilde{S}}_0,2\tilde{S}_0-S_0]/h})$) (*racine triple*)

$\lambda_5 = \mu(h) - \tilde{a} + b/3$ (*modulo* $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\inf[\tilde{\tilde{S}}_0,2\tilde{S}_0-S_0]/h})$) (*racine triple*).

Ainsi, bien que ne connaissant $\tilde{a}$ que modulo $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})$, on arrive, même lorsque $\tilde{S} > 2S_0$, à « observer » des décalages entre les valeurs propres de l'ordre de $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\tilde{\tilde{S}}_0/h})$.

§.5. PERTURBATION DU POTENTIEL POUR LE PROBLÈME DE DIRICHLET ASSOCIÉ A UN PUITS

5.1. Introduction.

L'intérêt d'étudier d'abord des problèmes de Dirichlet associés à un puits est clairement démontré dans [*11*] et au §.2. On étudie dans ce paragraphe l'effet d'une perturbation positive du potentiel.

On considère donc dans ce paragraphe le problème de Dirichlet :

$$\begin{aligned} (-h^2\Delta + V)u &= f \\ u\,|_{\partial\Omega} &= 0 \end{aligned} \tag{5.1.1}$$

dans un ouvert Ω borné, connexe, à frontière C^∞ de $\mathbb{R}^n$ ou d'une variété C^∞ compacte M.

On suppose que V est un potentiel C^∞ sur M et que

$$\left\{ \begin{array}{lll} V \geqslant 0 & \text{et} \quad V > 0 & \text{sur} \quad \partial\Omega \\ V = 0 & \quad x = x_0 \,. & \end{array} \right. \tag{5.1.2}$$

On désignera dans ce § par d_V la métrique d'Agmon associée à max $(V, 0)dx^2$, et on fait l'hypothèse suivante :

(5.1.3) $\forall x \in \Omega$, il existe une géodésique minimale de x à x_0 contenue dans Ω.

Soit P_Ω^V la réalisation autoadjointe du problème de Dirichlet et soit $(\lambda_j^V(h), \varphi_j^V(h)(x))$ la suite (rangée par ordre croissant pour les valeurs propres) des valeurs propres de P_Ω^V et des vecteurs propres associés.

Soit

(5.1.4) (ΔV) une fonction C^∞ positive à support compact dans Ω.

Introduisons un paramètre $t \in [-1, +1]$ et posons :

$$W_t = V + t(\Delta V)\,. \tag{5.1.5}$$

Considérons la réalisation de Dirichlet $P_\Omega^{W_t}$ correspondante. Il résulte immédiatement du principe du minimax que :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{Si} & t \geqslant 0, & \lambda_j^{W_t}(h) \geqslant \lambda_j^V(h) \\ \text{Si} & t \leqslant 0, & \lambda_j^{W_t}(h) \leqslant \lambda_j^V(h)\,. \end{array} \right. \tag{5.1.6}$$

On s'intéresse dans la suite essentiellement aux 2 cas suivants :

(5.1.7) CAS [A] : $t = 1$ et supp $(\Delta V) \cap \{ x_0 \} = \phi$.

(5.1.8) CAS [B] : t exponentiellement petit ;

et on veut déterminer un encadrement aussi précis que possible pour $\lambda_j^{W_t}(h) - \lambda_j^{V}(h)$.

5.2. Matrice de perturbation.

On va travailler dans l'esprit du § 2 de sorte que nous omettrons certains détails.

Notons pour simplifier :

$$P_t = P_\Omega^{V+t\Delta V} \quad \text{et} \quad \mu_j^t \text{ les valeurs propres}.$$

Soit $I(h)$ un intervalle tendant vers 0 (cf. § 2) et on désigne par E^t l'espace engendré par les $\varphi_j^{V+t\Delta V}(h)$ qu'on notera plus simplement φ_j^t correspondant aux μ_j^t dans $I(h)$. Sous des hypothèses convenables sur t, ΔV et $I(h)$, (cf. (5.1.7) et (5.1.8)), on peut supposer que la dimension de E^t est indépendante de t.

Posons

(5.2.1) $$v_j^t = \Pi_{E^t}\varphi_j^0 .$$

Alors :

$$\begin{aligned} P_t\varphi_j^0 &= \mu_j^0\varphi_j^0 + t(\Delta V)\varphi_j^0 \\ (P_t - z)\varphi_j^0 &= (\mu_j^0 - z)\varphi_j^0 + t(\Delta V)\varphi_j^0 \\ (P_t - z)^{-1}\varphi_j^0 &= (\mu_j^0 - z)^{-1}\varphi_j^0 + t(P_t - z)^{-1}(\mu_j^0 - z)^{-1}(\Delta V)\varphi_j^0 \end{aligned}$$

où z est dans un contour convenable entourant $I(h)$ (cf. § 2).

On obtient finalement (cf. (2.1.13) :

(5.2.2) $$v_j^t = \Pi_{E^t}\varphi_j^0 = \varphi_j^0 + t\oint(P_t - z)^{-1}(\mu_j^0 - z)^{-1}(\Delta V)\varphi_j^0 dz .$$

Posons :

(5.2.3) $$w_j^t = t\oint(P_t - z)^{-1}(\mu_j^0 - z)^{-1}(\Delta V)\varphi_j^0 dz$$

w_j^t appartenant à $F^\perp$ et, par exemple, sous les hypothèses (5.1.7) ou (5.1.8), on obtient (confer. lemme 2.1.1) :

(5.2.4) grad w_j^t, $w_j^t = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}\delta(x)} . t\right)$ où le $\tilde{\mathcal{O}}$ est uniforme par rapport à t

où

(5.2.5) $$\delta(x) = \inf_{y \in \operatorname{supp} \Delta V} [d(x_0, y) + d(y, x)]$$

(remarquons que dans les 2 cas (5.1.7) ou (5.1.8), ou bien $d_{V+\Delta V} \geqslant d_V$ ou bien $| d_V - d_{V+t\Delta V} |$ est très petit par rapport à h).

En particulier, on a :

(5.2.6) $$v_j^t = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{1}{h}d_V(x_0,x)}\right).$$

Posons maintenant :

(5.2.7) $$L = d_V(x_0, \operatorname{supp} \Delta V).$$

On a :

$$(v_j^t \mid v_k^t) = (\varphi_j^0 \mid \varphi_k^0) + (\varphi_j^0 \mid w_k^t) + (w_j^t \mid \varphi_k^0) + (w_j^t \mid w_k^t) = \delta_{jk} - (w_j^t \mid w_j^t)$$

d'où :

(5.2.8) $$(v_j^t \mid v_k^t) = \delta_{j,k} + t^2\tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2L}{h}}\right)$$

qu'on réécrit :

(5.2.9) $$S^t = ((v_j^t \mid v_k^t)) = I + T^t, \qquad T^t = t^2\tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2L}{h}}\right).$$

Continuant la procédure du § .2, on a :

(5.2.10) $$\Pi_{E^t}u = \sum_{j,k} a_{jk}^t(u \mid v_k^t)v_j^t$$

où $$\begin{aligned} a_{jk}^t = (S^t)^{-1} &= I - T^t + \tilde{\mathcal{O}}(t^4e^{-4L/h}) \\ &= I + t^2\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2L/h}). \end{aligned}$$

On en déduit l'expression de la matrice de $P^t \mid_{E^t}$ dans la base v_j^t :

(5.2.11) $$P^tv_k^t = \Pi_{E^t}P\varphi_k^0 = \mu_k^0 v_k^t + t\Pi_{E^t}(\Delta V\varphi_k^0).$$

La matrice de perturbation δ_{jk}^t est donc obtenue en posant :

(5.2.12) $$\delta_{jk}^t = t\sum_{\mu} a_{j,\mu}^t(\Delta V \,.\, \varphi_k^0 \mid v_\mu^t)$$

et la matrice de $P^t \mid_{E^t}$ dans la base v_k^t est :

(5.2.13) $$\operatorname{diag}(\mu_k^0) + \delta^t.$$

Notons maintenant que :

$$\begin{aligned} (\Delta V \,.\, \varphi_k^0 \mid v_\mu^t) &= \int \Delta V(x) \,.\, \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2}{h}[d_V(x_0,x)]}\right)dx \\ &= \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2L/h}). \end{aligned}$$

On obtient alors :

(5.2.14) $$\delta_{j,k}^t = t(\Delta V \,.\, \varphi_k^0 \mid \varphi_j^0) + t(\Delta V\varphi_k^0 \mid w_j^t) + t^3\tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{4L}{h}}\right)$$

(5.2.15) $$\delta_{j,k}^t = t(\Delta V\varphi_k^0 \mid \varphi_j^0) + t^2\tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2L}{h}}\right).$$

Si finalement, on revient à la base orthonormalisée : $v^t.(S^t)^{-1/2}$, on obtient :

THÉORÈME 5.2.1. — *Sous les hypothèses du §.5.1 et si (5.1.7) ou (5.1.8) est vérifiée, la matrice de* $P_t|_{E_t}$ *(correspondant à l'espace propre attaché à* $I(h)$ *pour* P_t*) est donnée dans la base orthonormalisée de* $(\Pi_{E_t}.\varphi_j^0)$ *par* :

$$\operatorname{diag} \mu_j^0 + (\mathscr{P})_{j,k} \tag{5.2.16}$$

où

$$\mathscr{P}_{j,k} = t(\Delta V.\varphi_k^0 \mid \varphi_j^0) + \frac{1}{2}t[(\Delta V.\varphi_k^0 \mid w_j^t) + (\Delta V.\varphi_j^0 \mid w_k^t)] + t^3\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{-4L}{h}}) \tag{5.2.17}$$

$$= t(\Delta V.\varphi_k^0 \mid \varphi_j^0) + t^2\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2L}{h}}). \tag{5.2.18}$$

COROLLAIRE 5.2.2. — *Sous les hypothèses* (5.1.7) *ou* (5.1.8), *on a* :

$$\lambda_j^V(h) \leqslant \lambda_j^{W_t}(h) \leqslant \lambda_j^V(h) + t\,|\,\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2L/h})\,| \quad \text{pour} \quad t \geqslant 0 \tag{5.2.19}$$

$$\lambda_j^V(h) + t\,|\,\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2L/h})\,| \leqslant \lambda_j^{W_t}(h) \leqslant \lambda_j^V(h) \quad \textit{pour} \quad t \leqslant 0\,. \tag{5.2.20}$$

REMARQUE 5.2.3. — Dans le cas où $t = 1$ (cas [A]), la formule (5.2.18) est peu exploitable pour obtenir des minorations de $\lambda_j^W - \lambda_j^V$, car le reste est du même ordre quand $h \to 0$.

Nous reviendrons sur ce problème au §.5.3.

REMARQUE 5.2.4. — Dans le cas où $t = 0(e^{-\varepsilon_0/h})$ (cas [B]), la formule (5.2.18) nous permet de bien comprendre le phénomène lorsque l'on renforce la positivité de la matrice $(\Delta V\varphi_k^0 \mid \varphi_j^0)$ par la condition renforcée :

Il existe $\rho(h)$ t. q.

$$\rho(h) > e^{-2L/h-\varepsilon/h} \qquad \forall\varepsilon > 0 \tag{5.2.21}$$

et tel que :

$$((\Delta V\varphi_k^0 \mid \varphi_j^0)) \geqslant \rho(h)\mathrm{Id}\,. \tag{5.2.22}$$

Supposons, par exemple, que $\Delta V(x_0) > 0$, alors on a $L = 0$ et il est facile de voir que l'on peut choisir $\rho(h) = (1 - \varepsilon)\Delta V(x_0)$ pour $\varepsilon > 0$.

Le principe du minimax montre alors que :

$$\rho(h) \leqslant \left| \frac{\lambda_j^{W_t} - \lambda_j^V}{t} \right| \leqslant \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2L}{h}})\,. \tag{5.2.23}$$

REMARQUE 5.2.5. — Il n'est pas toujours facile de vérifier (5.2.21) et (5.2.22); le résultat suivant peut être utile.

On suppose qu'il existe $\varepsilon_1 > 0$ t. q.

$$|\,\mu_j^0(h) - \mu_k^0(h)\,| \geqslant e^{-\varepsilon_1/h} \qquad \text{si} \qquad j \neq k\,. \tag{5.2.24}$$

C'est le cas en particulier si $\mu_j^0(h)$ et $\mu_k^0(h)$ ont des développements asymptotiques en h différents (cf. [11] pour l'existence de tels développements).

Alors, si $\varepsilon_0 > \varepsilon_1$ (cas [B]) et $t = \mathcal{O}(e^{-\varepsilon_0/h})$ ou plus généralement si :

(5.2.25) $$-h \operatorname{Log} |t| + 2L > \varepsilon_1$$

on peut appliquer le lemme A1.1 de l'appendice et on obtient que, sous l'hypothèse (5.2.52), on a :

(5.2.26) $$\lambda_j^{W_t}(h) = \mu_j^0(h) + t(\Delta V . \varphi_j^0 \mid \varphi_j^0) + t^2 \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2L}{h}}) + t^2 \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{4L+\varepsilon_1}{h}}).$$

On donnera au §.5.3, un moyen pour donner des minorations pour l'expression du type :

(5.2.27) $$(\Delta V . \varphi_j^0 \mid \varphi_j^0) \geqslant e^{-\frac{2L}{h}-\frac{\varepsilon}{h}} \qquad \forall \varepsilon > 0, \qquad \forall h < h(\varepsilon)$$

(qui est de l'ordre de $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2L}{h}})$) qui si $|t| \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}$ permettront de conclure.

5.3. Étude du cas [A] (cf. 5.1.17).

Si l'étude du cas [B] s'est avérée satisfaisante dans le § précédent sous réserve de montrer des inégalités du type (5.2.21)-(5.2.22) ou (5.2.24)-(5.2.27), on a remarqué (remarque 5.2.3) que la formule (5.2.18) était non satisfaisante.

Retournons à l'expression (5.2.17) ; les valeurs propres de P_t contenues dans $I(h)$, sont déterminées par :

(5.3.1) $$\operatorname{diag}(\mu_j) + \frac{1}{2} t[(\Delta V . \varphi_k^0, v_j^t) + ((\Delta V)\varphi_j^0, v_k^t)] \quad \text{modulo } t^3 \tilde{\mathcal{O}}(e^{-4L/h}).$$

Cependant l'étude précise du 2^e terme semble délicate.

Une autre manière de procéder est de partir des deux formules :

(5.3.2) $$(-h^2\Delta + V)\varphi_i^0 = \mu_i^0(h)\varphi_i^0$$

(5.3.3) $$(-h^2\Delta + V + t\Delta V)\varphi_j^t = \mu_j^t(h)\varphi_j^t.$$

Faisant le produit scalaire de la première par φ_j^t et utilisant la $2^{\text{ième}}$, on obtient les identités :

(5.3.4) $$(\varphi_i^0 \mid \varphi_j^t)[\mu_j^t(h) - \mu_i^0(h)] = t \int \Delta V . \varphi_j^t(x) . \varphi_i^0(x) dx, \qquad \forall i, \qquad \forall j.$$

En particulier, on obtient :

(5.3.5) $$(\varphi_i^0 \mid \varphi_i^t)[\mu_i^t(h) - \mu_i^0(h)] = t \int \Delta V . \varphi_i^t(x) . \varphi_i^0(x) dx.$$

Cette formule devient intéressante lorsque $(\varphi_i^0 \mid \varphi_i^t)$ est voisin de 1, ce qui est justement le cas lorsqu'on fait une hypothèse du type (5.2.24) de séparation sur les valeurs propres.

On va en fait procéder différemment en se ramenant au cas [B] et en utilisant la croissance par rapport à $t \in [0, 1]$ des $\mu_j^t(h)$.

On fait maintenant l'hypothèse suivante (cf. (5.2.24)-(5.2.25))

$$(5.3.6) \qquad \begin{cases} \exists 0 < \varepsilon_1 < 2\mathrm{L} \quad \text{t. q.} \\ |\mu_j^0(h) - \mu_k^0(h)| \geqslant e^{-\varepsilon_1/h}. \end{cases}$$

Remarquons maintenant que, pour tout $t \in [0, 1]$, on a :

$$(5.3.7) \qquad \mu_j^1(h) \geqslant \mu_j^t(h) \geqslant \mu_j^0(h).$$

On a la proposition :

PROPOSITION 5.3.1. — *Sous les hypothèses (5.1.7), (5.3.6) et (5.2.27), on a, pour tout $\varepsilon > 0$ et pour $h \leqslant h(\varepsilon)$, ($h(\varepsilon) > 0$ assez petit),*

$$\mu_j^1(h) - \mu_j^0(h) \geqslant e^{-\frac{2\mathrm{L}}{h} - \frac{\varepsilon}{h}}.$$

Démonstration. — Soit donc $\varepsilon > 0$ et soit $t = e^{-\frac{\varepsilon}{3h}}$. Alors il résulte de (5.2.26), (5.2.27) et (5.3.7) que :

$$\begin{aligned} \mu_j^1(h) - \mu_j^0(h) \geqslant \mu_j^t(h) - \mu_j^0(h) &\geqslant e^{-\varepsilon/3h} e^{-2\mathrm{L}/h + \varepsilon_2/h} \\ &- e^{-2\varepsilon/h} . e^{-2\mathrm{L}/h + \varepsilon_2/h} - e^{2\varepsilon/3h} . e^{-(4\mathrm{L} + \varepsilon_1)/h + \varepsilon_2/h} \end{aligned}$$

où, pour tout $\varepsilon_2 > 0$, cette inégalité est vérifiée $0 < h \leqslant h(\varepsilon_2)$; en prenant ε_2 assez petit, on obtient le résultat. ■

5.4. Étude de l'inégalité :

$$\int (\Delta \mathrm{V}) \, |\varphi_i^0(h)|^2 dx \geqslant e^{-\frac{2\mathrm{L}}{h} - \frac{\varepsilon}{h}} \qquad \forall \varepsilon > 0, \qquad \forall h \in]0, h(\varepsilon)].$$

La proposition 5.3.1 et la remarque 5.2.5 ont montré l'intérêt de démontrer une telle formule. On a déjà remarqué, qu'une telle formule ne posait pas de problème si $\Delta \mathrm{V}(x_0) > 0$, on s'intéresse donc dans ce § au cas où $\Delta \mathrm{V}(x_0) = 0$.

La première remarque stupide est que, tous les termes étant positifs, il suffit, pour montrer l'estimation voulue, de trouver un ouvert ω rencontrant le support de $(\Delta \mathrm{V})$ pour lequel on peut faire l'estimation voulue :

$$(5.4.1 \qquad \forall \omega \subset \Omega, \int_\Omega (\Delta \mathrm{V}) \, |\varphi_i^0(h)|^2 dx \geqslant \int_\omega (\Delta \mathrm{V}) \, |\varphi_i^0(h)|^2 dx.$$

On va démontrer la :

PROPOSITION 5.4.1. — *On suppose que* $\mathrm{V}''(x_0) > 0$ *et que les* $\mu_j^0(h)$ *ont* *des développements asymptotiques distincts, alors, pour tout* $\varepsilon > 0$, $\exists h(\varepsilon) > 0$ *t. q.*

$$(5.4.2) \qquad \int (\Delta V) \,|\, \varphi_i^0(h) \,|^2 dx \geqslant e^{-\frac{2L}{h} - \frac{\varepsilon}{h}}, \qquad 0 < h < h(\varepsilon).$$

Démonstration. — Remarquons tout d'abord que la proposition est claire dans le cas $n = 1$, compte tenu des résultats rappelés au § . 1.

Compte tenu de (5.4.1), il suffit de trouver, pour tout $\varepsilon > 0$, dans l'ouvert $B(x_0, L + \varepsilon) \cap \overbrace{\mathrm{Supp}\,\Delta V}^{\circ}$ un ouvert ω_ε où on connaît « bien » $\varphi_i^0(h)(x)$. On procède ainsi :

Par définition de L, il existe pour tout $\varepsilon > 0$, un point $x_\varepsilon \in \Omega$ t. q.

$$(5.4.3) \qquad V(x_\varepsilon) > 0 \quad \text{et} \quad d_V(x_\varepsilon, x_0) < L + \frac{\varepsilon}{4}.$$

Soit γ une géodésique minimale de x_ε à x_0 dont l'existence est assurée par (5.1.3).

Quitte à remplacer x_ε par un point arbitrairement voisin y_ε situé sur γ et vérifiant également (5.4.3), on obtient finalement un point y_ε vérifiant (5.4.3) et un ouvert Ω_ε contenant la géodésique de 0 à y_ε et vérifiant les hypothèses (5.11) à (5.13) de [*11*].

Sous l'hypothèse de la proposition 5.4.1, il résulte du théorème 5.8 de [*11*] (cf. également la remarque suivant le point (5.10) dans [*11*]) que dans Ω_ε, il existe un symbole formel en h

$$(5.4.4) \qquad a_V^j(x, h) = h^{-n/4 - v_j/2}[a_0^j(x) + h^{1/2} a_1^j(x) + \ldots$$

tel que :

$$(5.4.5) \quad \varphi_j^0(x, h) - a_V^j(x, h) e^{-\frac{d_V(x, x_0)}{h}} = \mathcal{O}(h^\infty) e^{-\frac{d_V(x, x_0)}{h}} \quad \text{dans} \quad \Omega_\varepsilon.$$

On utilise maintenant le :

LEMME 5.4.2. — *Dans tout ouvert* ω *de* Ω_ε, *il existe un ouvert* ω_0 *et* k *t. q.* $a_k^j(x) \neq 0$, $\forall x \in \omega_0$.

En effet, raisonnons par l'absurde. Si le lemme était faux, il existerait un ouvert ω dans lequel $a_V^j(x, h) \equiv 0 \,(\mathrm{mod}\, 0(h^\infty))$. Les $a_k^j(x)$ étant définis par des équations de transports, on aurait $a_V^j(x, h) \equiv 0$ dans la réunion des géodésiques joignant un point de ω à x_0. En particulier, il existe un cône géodésique d'origine x_0 d'intérieur non vide dans lequel tous les $a_k^j(x)$ sont nuls. En particulier tous les $a_k^j(x)$ sont plats en 0. On obtient une contradiction entre cette dernière affirmation, (5.4.5) et $\| \varphi_j^0(x, h) \| = 1$ grâce au théorème de la phase stationnaire. ■

On applique le lemme à

$$\omega = \Omega_\varepsilon \cap B(x_0, L + \varepsilon) \cap (\Delta V)^{-1}\left(\left] \frac{(\Delta V)(y_\varepsilon)}{2}, + \infty \right[\right)$$

et on obtient facilement dans l'ouvert ω_ε ainsi obtenu :

$$\int_{\omega_\varepsilon} (\Delta V) \,|\, \varphi_j^0(x, h) \,|^2 dx \geqslant h^{-v} . e^{-\frac{2L}{h} - \frac{\varepsilon}{2h}} . C_\varepsilon \quad \text{avec} \quad C_\varepsilon > 0 . \quad \text{C. Q. F. D.}$$

On a ainsi démontré par exemple les théorèmes suivants :

THÉORÈME 5.4.3. — CAS [A]). *On suppose que* :

$$(\mathrm{H}) \quad \begin{cases} \textit{Les hypothèses (5.1.1) à (5.1.4) sont satisfaites, } V''(x_0) > 0 \textit{ et} \\ \textit{les valeurs propres } \lambda_j^V(h) \textit{ contenues dans } I(h) \textit{ ont des développements} \\ \textit{asymptotiques distincts.} \end{cases}$$

Alors si $L = d(x_0, \operatorname{Supp} \Delta V)$ *est* > 0, *les valeurs propres* $\lambda_j^{V+\Delta V}(h)$ *de* $-h^2\Delta + V + \Delta V$ *contenues dans* $I(h)$ *vérifient* :

Pour tout $\varepsilon > 0$, *il existe* $h(\varepsilon) >$ *t. q.* $\forall h \in \,]0, h(\varepsilon)[$ *on ait* :

$$e^{-\frac{2L}{h} + \frac{\varepsilon}{h}} \geqslant \lambda_j^{V+\Delta V}(h) - \lambda_j^V(h) \geqslant e^{-\frac{2L}{h} - \frac{\varepsilon}{h}}.$$

THÉORÈME 5.4.4. — (CAS [B]). *Sous l'hypothèse* [H], *alors, pour* $|\, t \,| \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}$ $(\varepsilon_0 > 0)$, *les valeurs propres de* $\lambda_j^{V+t\Delta V}$ *de* $-h^2\Delta + V + t\Delta V$ *sont déterminées par* :

$$\frac{\lambda_j^{V+t\Delta V} - \lambda_j^V}{t} = (\Delta V \varphi_j^0 \,|\, \varphi_j^0)[1 + \widetilde{\mathcal{O}}(e^{-\varepsilon_0/2h})]$$

où $(\Delta V . \varphi_j^0 \,|\, \varphi_j^0)$ *vérifie, pour tout* $\varepsilon > 0$ *et pour* h *dans* $]0, h(\varepsilon)[\,(h(\varepsilon) > 0)$:

$$e^{-\frac{2L}{h} - \frac{\varepsilon}{h}} \leqslant (\Delta V . \varphi_j^0 \,|\, \varphi_j^0) \leqslant e^{-\frac{2L}{h} + \frac{\varepsilon}{h}}.$$

5.5. Estimations sur les fonctions propres pour le problème de Dirichlet attaché à un puits.

On a vu au §.5.4 comment une bonne connaissance des fonctions propres $\varphi_j^V(h)$ dans un ouvert dense de Ω permettait de bien contrôler les perturbations des valeurs propres correspondant à des perturbations du potentiel.

En vue d'applications au problème à plusieurs puits, on s'intéresse à des résultats plus précis en un point de Ω où l'estimation (5.4.4)-(5.4.5) est vérifiée.

On garde les hypothèses du §.5.1, (5.1.1), (5.1.2) et (5.1.3), $V''(x_0) > 0$ et on considère une fonction propre normalisée $\varphi^V(h)(x)$ correspondant à une valeur propre $\lambda^V(h)$ située dans $[0, Ch]$.

On renforce les hypothèses de séparation imposées aux § précédents, en supposant qu'il existe $C > 0$ t. q.

$$(5.5.1) \qquad B\left(\lambda^{v}(h), \frac{1}{C} h\right) \cap \text{Spectre } P_M(h) = \lambda^{v}(h).$$

On s'intéresse maintenant au comportement de $\varphi^{v}(h)(x)$ dans un ouvert $\omega \subset \Omega$ t. q.

$$(5.5.2) \qquad \left\{ \begin{array}{l} \forall x \in \omega, \text{il existe une unique géodésique minimale joignant } x \text{ à } x_0 \\ \text{et } x \to d(x, x_0) \text{ est } C^\infty. \end{array} \right.$$

On a alors rappelé en (5.4.5) que l'on avait :

$$(5.5.3) \qquad \varphi^{v}(h)(x) - a^{v}(x, h)e^{-\frac{d_V(x,x_0)}{h}} = \mathcal{O}(h^\infty)e^{-\frac{d_V(x,x_0)}{h}} \qquad \text{dans } \omega$$

où

$$(5.5.4) \qquad a^{v}(x, h) = h^{-\frac{n}{4}-\frac{v}{2}}\left[\sum_{k \in \mathbb{N}} a_k(x)h^k\right].$$

On s'intéresse maintenant à donner des critères simples pour que $a_0(x)$ soit différent de zéro.

On va maintenant exploiter la condition (5.5.1). Pour simplifier (légèrement la discussion), on supposera que $M = \mathbb{R}^n$.

On désigne par λ_i les valeurs propres de $\frac{1}{2}V''(x_0)$; les valeurs propres de l'oscillateur harmonique « tangent » à l'opérateur $P_{M_1}(h)$ en x_0 :

$$- h^2\Delta_y^2 + \frac{1}{2}(V''(x_0)y \cdot y)$$

sont donc de la forme :

$$(5.5.5) \qquad \left(\sum_{i=1}^{n} \sqrt{\lambda_i}[2\alpha_i + 1]h\right), \qquad \alpha \in \mathbb{N}^n$$

et sous l'hypothèse (5.5.1), il existe un *unique* $\alpha \in \mathbb{N}^n$ t. q.

$$(5.5.6) \qquad \left|\lambda^{v}(h) - \sum_{i=1}^{n} \sqrt{\lambda_i}(2\alpha_i + 1)h\right| \leqslant Ch^2, \qquad h \to 0.$$

Après changement de variable, on peut supposer que :

$$(5.5.7) \qquad V(x) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i(x^i - x_0^i)^2 + \mathcal{O}(|x - x_0|^3)$$

et les calculs du §.3 de [*11*] (cf. également [*18*]) montrent que $\varphi^{V}(h)(x)$ est bien approché par la fonction propre $h^{-\nu/2-n/4}\Psi^{\alpha}\left(\frac{x-x_0}{\sqrt{h}}\right)$ où Ψ^{α} est la fonction propre de $-\Delta_y^2+\sum_{i=1}^{n}\lambda_i y_i^2$ correspondant à la valeur propre $\left(\sum_{i=1}^{n}\sqrt{\lambda_i}[2\alpha_i+1]\right)$ et où $\nu=\Sigma\,|\,\alpha_i\,|$.

En particulier, on a :

$$a_0(x)=\mathrm{P}^{\alpha}_{\mathrm{hom}}(x-x_0)+\mathcal{O}(\,|\,x-x_0\,|^{\nu+1}) \tag{5.5.8}$$

où $\mathrm{P}^{\alpha}_{\mathrm{hom}}(y)$ est la partie homogène du polynôme d'hermite

$$\Psi^{\alpha}(y)\,.\,e^{+\frac{1}{2}\Sigma\sqrt{\lambda_i}y_i^2}$$

$$\mathrm{P}^{\alpha}_{\mathrm{hom}}(y)=\mathrm{C}_{\alpha}\,.\,y_1^{\alpha_1}\,\ldots\,y_n^{\alpha_n},\qquad \mathrm{C}_{\alpha}\neq 0\,. \tag{5.5.9}$$

On obtient ainsi la :

PROPOSITION 5.5.1. — CAS M = $\mathbb{R}^n$ *pour simplifier). Sous les hypothèses (5.1.1), (5.1.2), (5.1.3), (5.5.1), (5.5.2) et (5.5.5), il existe* $\alpha\in\mathbb{N}^n$ *t. q. pour* $\varphi^{V}(x)$, *on ait :*

$$\left|\lambda^{V}(h)-\sum_{i=1}^{n}\sqrt{\lambda_i}(2\alpha_i+1)h\right|\leqslant \mathrm{C}h^2\,.$$

De plus, dans ω :

$$\varphi^{V}(h)(x)=h^{-\frac{n}{4}-\Sigma\frac{|\alpha_j|}{2}}[a_0(x)+0(h)]e^{-\frac{d_V(x,x_0)}{h}} \tag{5.5.10}$$

et $a_0(x)$ *est non nul en un point* x *de* ω, *si :*

(5.5.11) $\left\{\right.$ *La tangente en* x_0 *(cf. [12] pour une discussion plus précise) a la géodésique minimale joignant* x_0 *à* x *n'est pas orthogonale aux vecteurs propres* e_i *de* $\mathrm{V}''(x_0)$ *associées aux valeurs propres* λ_i *t. q.* $\alpha_i\neq 0$.

Cette dernière condition est vide lorsque $n=1$ *ou* $\alpha=(0,\ldots,0)$.

Démonstration. — Si $a_0(x_1)$ était nul, compte tenu des équations de transport qu'il vérifie, il serait nul le long de la géodésique minimale γ_{x_0,x_1} joignant x_0 à x_1. On aurait donc, compte tenu de (5.5.8)

$$\forall x\in\gamma_{x_0,x_1},\qquad \mathrm{P}^{\alpha}_{\mathrm{hom}}(x-x_0)=\widetilde{\mathcal{O}}(\,|\,x-x_0\,|^{\nu+1})\,. \tag{5.5.12}$$

En particulier, divisant dans (5.5.12) par $|\,x-x_1\,|^{\nu}$ et faisant tendre x

vers x_0 en restant sur γ_{x_0,x_1}, on obtiendrait que, pour la tangente unitaire t en x_0, on aurait :

$$\mathrm{P}^{\alpha}_{\mathrm{hom}}(t) = 0 . \tag{5.5.13}$$

Compte tenu de l'expression de (5.5.9), le résultat est démontré.

REMARQUE 5.5.2. — La condition (5.5.11) n'est pas générique (pour $n > 1$) car presque toutes les géodésiques arrivent tangentiellement au vecteur correspondant à la plus petite valeur propre de $V''(x_0)$, ce qui implique $\alpha_2 = \ldots = \alpha_{n-1} = 0$ (cf. [*12*]).

§.6. APPLICATION : RÉSULTATS DE JONA-LASSINIO, MARTINELLI ET SCOPPOLA DANS LE CAS $n > 1$

6.1. Étude de la matrice d'interaction dans le cas de puits simples.

Les théorèmes 2.2 et 2.3 ont montré tout l'intérêt qu'il y avait de bien calculer le terme d'interaction $w_{\alpha,\beta}$ entre les fonctions propres φ_α et φ_β :

$$w_{\alpha,\beta} = h^2 \int \chi_{j(\alpha)}(\varphi_\beta \nabla \varphi_\alpha - \varphi_\alpha \nabla \varphi_\beta) \nabla \chi_{j(\beta)} dx . \tag{6.1.1}$$

Lorsque φ_α et φ_β sont associés à des puits *différents*, le cas générique semble être que $w_{\alpha\beta}$ qui est toujours de l'ordre de $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-1/hd(\mathrm{U}_{j(\alpha)},\mathrm{U}_{j(\beta)})})$ admet une minoration du même type :

$$|\, w_{\alpha,\beta} \,| \geqslant e^{-\frac{1}{h}d(\mathrm{U}_{j(\alpha)},\mathrm{U}_{j(\beta)}) - \frac{\varepsilon}{h}}, \qquad \forall \varepsilon > 0, \qquad \forall h \in \,]0, h(\varepsilon)[\, . \tag{6.1.2}$$

On va donner dans ce paragraphe des hypothèses simples pour avoir :

$$\exists \mathrm{C} \geqslant 0, \qquad \exists \nu \in \mathbb{R} \quad \text{t. q.}$$

$$|\, w_{\alpha,\beta} \,| \geqslant \mathrm{C} e^{-\frac{1}{h}d(\mathrm{U}_{j(\alpha)},\mathrm{U}_{j(\beta)})} . h^{\nu} . \tag{6.1.3}$$

Ces estimations sont connues (sous des hypothèses raisonnables) dans les 2 cas suivants :

CAS 1 : $n = 1$ (cf. §.1).

CAS 2 : φ_β et φ_α correspondent aux niveaux fondamentaux pour les problèmes de Dirichlet $\mathrm{P}_{\mathrm{M}_{j(\alpha)}}(h)$ et $\mathrm{P}_{\mathrm{M}_{j(\beta)}}(h)$, (Théorème 6.6 de [*11*] et [*1*] [*20*]).

On va développer dans ce paragraphe les arguments utilisés pour le théorème 6.6 de [*11*], pour donner des conditions générales pour l'obtention de (6.1.3).

THÉORÈME 6.1.1. — *On prend les hypothèses générales du §.2.*

Soit $(\varphi_\alpha, \mu_\alpha)$ et $(\varphi_\beta, \mu_\beta)$ deux fonctions propres normalisées associées aux puits $M_{j(\alpha)}$ et $M_{j(\beta)}$ avec :

(6.1.4) $\begin{cases} j(\alpha) \neq j(\beta). \text{ Les puits } U_{j(\alpha)} \text{ et } U_{j(\beta)} \text{ sont réduits à des points } x_{j(\alpha)}, \\ x_{j(\beta)} \text{ et non dégénérés.} \end{cases}$

(6.1.5) $\begin{cases} \text{Pour la métrique d'Agmon, il existe une unique géodésique minimale entre } x_{j(\alpha)} \text{ et } x_{j(\beta)} \\ \text{ne rencontrant pas les autres puits.} \end{cases}$

(6.1.6) $\begin{cases} \text{Pour } (\varphi_\alpha, \mu_\alpha) \text{ (resp. } (\varphi_\beta, \mu_\beta)) \text{ les hypothèses de la proposition (5.5.1)} \\ \text{sont satisfaites ;} \end{cases}$

(6.1.7) $$\mu_\alpha - \mu_\beta = \mathcal{O}(h^\infty).$$

Alors il existe $\nu_{\alpha\beta}$ (calculable) tel que (6.1.3) soit vérifiée :

(6.1.8) $$|w_{\alpha\beta}| \geqslant C_{\alpha\beta} e^{-\frac{1}{h} d(U_{j(\alpha)}, U_{j(\beta)})} . h^{\nu_{\alpha\beta} - \frac{n}{2}}.$$

Démonstration. — D'après (6.1.7) et (2.25′) (dans [*11*]), on a :

(6.1.9) $$w_{\alpha,\beta} \equiv h^2 \int_\Gamma \left(\varphi_\alpha \frac{\partial \varphi_\beta}{\partial n} - \varphi_\beta . \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial n} \right) ds + \mathcal{O}\left(h^\infty . e^{-\frac{1}{h} d(U_{j(\alpha)}, U_{j(\beta)})}\right)$$

où Γ est une hypersurface (réduite à 1 point si $n = 1$) normale à $\gamma_{j(\alpha),j(\beta)}$ en un point de $\gamma_{j(\alpha),j(\beta)}$ distinct de $x_{j(\alpha)}$ et $x_{j(\beta)}$, par exemple le milieu $x_{j(\alpha),j(\beta)}$ entre $x_{j(\alpha)}$ et $x_{j(\beta)}$.

Compte tenu de (6.1.6), on peut avoir l'expression (5.5.10) de φ_α et φ_β dans un voisinage $w_{\alpha\beta}$ assez petit de $x_{j(\alpha),j(\beta)}$ et on a donc en particulier sur Γ :

(6.1.10) $$\begin{cases} \varphi_\alpha(x) = h^{-\frac{n}{4} - \frac{\nu_\alpha}{2}} [a_0^\alpha(x) + 0(h)] e^{-\frac{d_V(x, x_{j(\alpha)})}{h}} \\ \varphi_\beta(x) = h^{-\frac{n}{4} - \frac{\nu_\beta}{2}} [a_0^\beta(x) + 0(h)] e^{-\frac{d_V(x, x_{j(\beta)})}{h}} \end{cases}$$

et

(6.1.11) $$\begin{cases} \dfrac{\partial \varphi_\alpha}{\partial n}(x) = h^{-1-\frac{n}{4} - \frac{\nu_\alpha}{2}} [a_0^\alpha(x) + 0(h)] \dfrac{\partial \psi_\alpha}{\partial n}(x) \\ \dfrac{\partial \varphi_n}{\partial n}(x) = h^{-1-\frac{n}{4} - \frac{\nu_\beta}{2}} [a_0^\beta(x) + 0(h)] \dfrac{\partial \psi_\beta}{\partial n}(x) \end{cases}$$

où $\psi_\alpha(x) = d_V(x, x_{j(\alpha)})$, $\quad \psi_\beta = d_V(x, x_{j(\beta)})$ et

(6.1.12) $$a_0^\beta(x) \neq 0, \qquad a_0^\alpha(x) \neq 0, \qquad \forall x \in \Gamma.$$

Remarquons maintenant que :

(6.1.13) $$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial n} = - \frac{\partial \psi_\beta}{\partial n} = V^{\frac{1}{2}}(x_{j(\alpha),j(\beta)}) \neq 0 \qquad \text{en} \quad x_{j(\alpha),j(\beta)}.$$

On obtient facilement (6.1.8) en prenant $v_{\alpha\beta} = v_\alpha + v_\beta$. ■

REMARQUE 6.1.2. — Le théorème 6.6 de [11] est un corollaire du théorème 6.1.1, où on considère les niveaux fondamentaux.

6.2. Extension des résultats de Jona-Lassinio, Martinelli et Scoppola au cas $n > 1$.

On se contente ici de traiter l'exemple de la déformation d'un double puits symétrique, mais compte tenu des paragraphes et sous-paragraphes précédents, il est clair qu'on a développé toutes les techniques voulues pour aborder le cas général.

Pour éviter trop de renvois, on va rappeler toutes les hypothèses dans ce cas particulier. On s'intéresse dans M $(= \mathbb{R}^n$ ou variété compacte) aux valeurs propres de $-h^2\Delta + V$. On suppose :

(6.2.1) $V \in C^\infty, \qquad V \geqslant 0, \qquad \lim_{|x| \to \infty} V > 0 \quad (\text{si } M = \mathbb{R}^n)$

(6.2.2) $V^{-1}(0) = \{x_1\} \cup \{x_2\}, \qquad x_1 \neq x_2, \qquad V''(x_i)$ défini positif.

(6.2.3) Pour la métrique d'Agmon, il existe une seule géodésique minimale γ_{12} entre x_1 et x_2.

(6.2.4) Il existe une isométrie g de M dans M t. q. $V(gx) = V(x), \forall x \in M$; $gx_1 = x_2$; $g^2 = id$.

Selon la procédure décrite dans les paragraphes précédents, on associe à chaque puits $\{x_i\}$ un problème de Dirichlet $P^V_{M_i}(h)$ et on fait sur l'intervalle $I(h)$ dans lequel nous regarderons le spectre de $P(h)$ l'hypothèse :

$$(6.2.5)\quad \begin{cases} I(h) =]C_0 . h, C_1 h[; \\ I(h) \text{ ne contient qu'une valeur propre } \mu^V(h) \text{ de } P^V_{M_1}(h) \text{ et } \exists \varepsilon > 0 \text{ t.q.} \\ I(h) + B(0, \varepsilon h) \text{ ne contient également que } \mu^V(h). \end{cases}$$

Par symétrie, l'hypothèse (6.2.5) relative à $P^V_{M_1}(h)$ est satisfaite également pour $P_{M_2}(h)$.

Dans ce cas particulier, il y a 2 valeurs propres de $P(h)$ contenues dans $I(h)$, $\lambda^+(h)$ et $\lambda^-(h)$ vérifiant :

$$(6.2.6)\qquad \lambda^{\pm V}(h) = \mu^V(h) \pm \beta(h) \quad (\text{modulo } (e^{-\frac{2d_V(x_1,x_2)}{h}}))$$

où

$$(6.2.7)\qquad \beta(h) = |w_{12}|.$$

Sous des hypothèses naturelles (que l'on ne réécrit pas ici), le théorème 6.1.1 s'applique et on obtient :

$$(6.2.8)\qquad |w_{12}| \geqslant Ch^{\nu} e^{-\frac{d(x_1,x_2)}{h}}$$

On introduit maintenant une perturbation (ΔV) positive de V :

$$(6.2.9)\qquad \Delta V \in C_0^{\infty}(M), \qquad \Delta V \geqslant 0, \qquad \operatorname{supp} \Delta V \cap (\{x_1\} \cup \{x_2\}) = \phi,$$

et un paramètre $t \in [-e^{-\varepsilon_0/h}, 1]$ pour ε_0 convenable.

On peut alors sans problème supposer que Supp $\Delta V \subset M_1 \cap M_2$ (avec les notations du §.2) de sorte que la théorie développée au §.5 s'applique.

On garde également toutes les hypothèses de ce paragraphe. On s'intéresse maintenant aux variations des deux valeurs propres de $P^t(h) = -h^2\Delta + V + t\Delta V$ quand t parcourt l'intervalle $\mathscr{I}(h) = [-e^{-\varepsilon_0/h}, 1]$.

Remarquons tout d'abord que la distance d'Agmon relative au potentiel $W^t = V + t\Delta V$ peut être modifiée mais qu'on a toujours :

$$(6.2.10)\qquad 0(h^{\infty}) + d_{W^t} \geqslant d_V .$$

On notera $\mu_i^t(h)$ la valeur propre de $P_{M_i}^t(h)$ contenue dans $I(h)$.

Alors, on sait que les valeurs propres de $P^t(h)$ sont obtenues modulo $\widetilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2d(x_1,x_2)}{h}})$ en calculant les valeurs propres de la matrice :

$$(6.2.11)\qquad \begin{pmatrix} \mu_1^t(h) & w_{12}^t(h) \\ w_{12}^t(h) & \mu_2^t(h) \end{pmatrix}$$

où $w_{12}^t(h)$ correspond à l'interaction entre $\varphi_1^t(h)$ et $\varphi_2^t(h)$.

Étude pour $|t| \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}$.

On peut ici oublier la condition sur le support de ΔV. Si on travaille modulo $\widetilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{d(x_1,x_2)}{h}-\frac{\varepsilon_0}{h}})$, on voit que les valeurs propres de $P^t(h)$ sont déterminées plus simplement par la matrice

$$(6.2.12)\qquad \begin{pmatrix} \mu_1^t(h) & w_{12} \\ w_{12} & \mu_2^t(h) \end{pmatrix}.$$

Si $\lambda_1^t(h)$ et $\lambda_2^t(h)$ sont les valeurs propres de $P^t(h)$, on a donc (cf. l'introduction dans [*11*])

$$(6.2.13)\qquad |\lambda_1^t(h) - \lambda_2^t(h)| = \sqrt{4w_{12}^2 + (\mu_1^t - \mu_2^t)^2} + \mathcal{O}(e^{-\frac{d(x_1,x_2)}{h}-\frac{\varepsilon_0}{h}}).$$

En particulier, on a toujours, pour h assez petit :

$$(6.2.14)\qquad |\lambda_1^t(h) - \lambda_2^t(h)| \geqslant 2[1 - e^{-\frac{\varepsilon_0}{h}}]\,|w_{12}| \geqslant Ch^{\nu}.e^{-\frac{d(x_1,x_2)}{h}}$$

L'expression de $(\mu_1^t - \mu_2^t)$ se déduit du théorème 5.4.4. On obtient :

$$(6.2.15)\quad \begin{cases} |\mu_1^t(h) - \mu_2^t(h)| = |t|\,|[\Delta V.\varphi_1^0, \varphi_1^0] - [\Delta V.\varphi_2^0, \varphi_2^0]| \\ \textit{modulo } \tilde{\mathcal{O}}\big(|t|\, e^{-\frac{\varepsilon_0}{h} - \inf\frac{[2L_1, 2L_2]}{h}}\big) \end{cases}$$

où
$$L_1 = d(x_1, \operatorname{supp} \Delta V)$$
$$L_2 = d(x_2, \operatorname{supp} \Delta V),$$

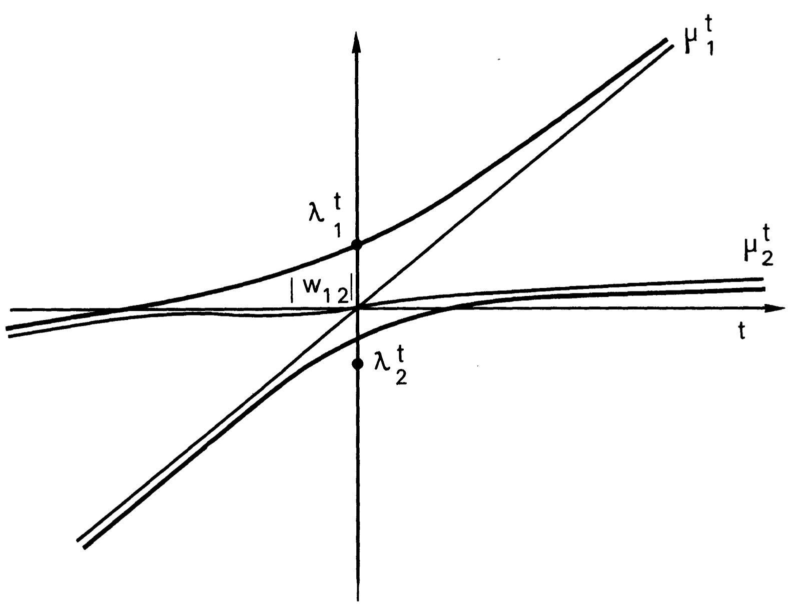
Si $L_1 < L_2$, la formule devient :

$$(6.2.16)\quad |\mu_1^t(h) - \mu_2^t(h)| = |t|\,([\Delta V.\varphi_1^0, \varphi_1^0]| + |t|\,\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2L_1}{h} - \frac{\varepsilon_0}{h}})).$$

On a donc : $\left|\dfrac{\mu_1^t(h) - \mu_2^t(h)}{t}\right| \approx \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2L_1}{h}})$.

(6.2.17) Si $2\,L_1 > S_0 - \varepsilon_0$ ce terme est toujours très petit et essentiellement $|\lambda_1^t(h) - \lambda_2^t(h)| \approx 2\,|w_{12}|$.
La perturbation ne crée aucun changement notable.

(6.2.18) Si $2\,L_1 < S_0 - \varepsilon_0$, on a le schéma suivant pour les valeurs propres :



(6.2.18)

Si $\lambda_1^t(h)$ et $\lambda_2^t(h)$ sont les valeurs propres choisies continues par rapport à t, on a :

$$\frac{\lambda_1^t(h)}{\mu_1^t(h)} \underset{h\to 0}{\longrightarrow} 1 \quad \text{pour} \quad t \text{ « grand »}$$

(de l'ordre de $e^{-\varepsilon/h}$ avec $\varepsilon < S_0 - 2\,L_1$)

et

$$\frac{\lambda_1^t(h)}{\mu_2^t(h)} \underset{h\to 0}{\longrightarrow} 1 \quad \text{pour} \quad (-\,t) \text{ « grand »}.$$

On observe également que la fonction propre $\varphi_1^t(h)$ qui correspond à λ_1^t est essentiellement localisée dans le puits (x_2) pour $t > 0$, équilocalisée pour $t = 0$ et se localise dans le puits (x_1) pour $t < 0$.

Étude pour $t = 1$.

On distingue plusieurs cas (on pose $S_0 = d_V(x_1, x_2)$).

CAS 1 : Si $2\,L_i > S_0$ $(i = 1, 2)$, il résulte des formules (6.2.12) et (6.2.13) que :

$$\lambda^{\pm(V+\Delta V)} = \lambda^V \pm \beta(h)$$

$$\left(\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2}{h}[\inf[L_1, L_2, S_0]]}\right)\right)$$

CAS 2 : $L_2 > L_1$; $L_1 < \dfrac{S_0}{2}$.

L'interaction disparaît et on a :

$$\lambda^{+(V+\Delta V)} = \mu_1^{V+\Delta V} \left(\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2S_0}{h}+\frac{2L_1}{h}}\right)\right)$$

$$\lambda^{-(V+\Delta V)} = \mu_2^{V+\Delta V} \left(\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2S_0}{h}+\frac{2L_2}{h}}\right)\right)$$

$$= \mu(h) \quad \left(\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2L_2}{h}}\right) + \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2S_0}{h}+\frac{2L_2}{h}}\right)\right).$$

En particulier, le théorème 5.4.3 donne :

$$e^{-\frac{2L_1}{h}-\frac{\varepsilon}{h}} \leqslant |\lambda^{+(V+\Delta V)} - \lambda^{-(V+\Delta V)}| \leqslant e^{-\frac{2L_1}{h}+\frac{\varepsilon}{h}}$$

$$\forall \varepsilon > 0, \qquad \forall h \in \,]0, h(\varepsilon)[\,.$$

Dans ce cas, l'interaction a essentiellement disparu entre les 2 puits. Les phénomènes observés ici sont ceux observés (dans le cas $n = 1$) par [*13*]. Nous donnerons de nouveaux exemples au paragraphe suivant.

§.7. PERTURBATIONS DU PROBLÈME A n PUITS SUR LE TORE OU SUR $\mathbb{R}$

7.1. Problèmes non perturbés.

On reprend dans ce paragraphe la discussion du paragraphe 4.1. On retrouvera en les précisant des résultats de [*13*].

7.1.1. *Le cas symétrique sur* S^1.

Plaçons-nous tout d'abord sur le cercle S^1 de longueur 2π sur lequel on place q puits $(q > 1)\{x_l\}$ invariants par translation de $\dfrac{2\Pi}{q}$ et non dégénérés que l'on placera aux points $\dfrac{(2l-1)}{q}\Pi$ $(l = 1, \ldots, q)$.

$q = 3$

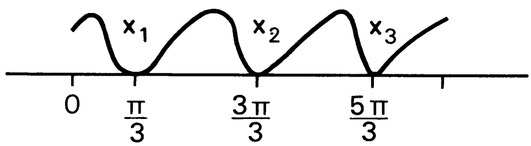


FIG. 7.1.1.

On a vu que le décalage des valeurs propres proches de la $k^{\text{ième}}$ valeur propre $\mu_k(h)$ du problème de Dirichlet relatif à un puits était dicté par la matrice :

$$\text{(7.1.2)} \qquad W^k(h) = \alpha_k^q(h)\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \ddots & & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

et que, si S_0 désigne la distance entre 2 puits consécutifs, on a (cf. §.1), après quelques calculs que nous omettons, et en normalisant par $V''(x_i) = 2$:

$$\text{(7.1.3)} \quad \alpha_k^q(h) = \delta_q h^{\frac{1}{2}-k} \cdot \frac{\Pi^{-1/2}}{k!} \cdot 2^{k+1}\left[\exp(k+1)A\right] e^{-\frac{S_0}{h}}\left[1 + 0_q^k(h)\right]$$

où

$$A = \lim_{\varepsilon \to 0}\left(\int_{-a+\varepsilon}^{a-\varepsilon}\left(\frac{1}{2\sqrt{V}}\right)dt + \operatorname{Log}\varepsilon\right)$$

et où
$$\delta_q = 1 \quad \text{si} \quad q > 2$$
$$\delta_q = 2 \quad \text{si} \quad q = 2$$
(il y a 2 contributions pour $q = 2$).

Rappelons que les valeurs propres de la matrice

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & & 1 \\ & \ddots & \ddots & & 0 \\ 1 & 0 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & 0 & \ddots & 1 \\ 1 & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

sont données par :

(7.1.4) $$\lambda_l^q = 2 \cos \frac{l\Pi}{q} \qquad (l = 0, \ldots, q-1) \quad \text{si} \quad q > 2 .$$

(7.1.5) $$\lambda = \pm 1 \qquad \text{si} \quad q = 2 .$$

On obtient donc que les valeurs propres sont de la forme

(7.1.6) $$\lambda_l^k(h) = \tilde{\mu}_k(h) + 2 \cos \frac{l\Pi}{q} . \alpha_k(h)[1 + 0_q^k(h)], \qquad l = 0, \ldots, q-1$$

avec $\tilde{\mu}_k(h) - \mu_k(h) = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})$ où S_0 est la distance entre 2 puits et $\alpha_k(h)$ est donné par :

(7.1.7) $$\alpha_k(h) = h^{\frac{1}{2}-k} \frac{\Pi^{-1/2}}{k\,!} 2^{k+1} \exp((k+1)A) e^{-\frac{S_0}{h}} .$$

Notons que $\alpha_k(h)$ est indépendant de q !

7.1.2. *Le cas symétrique sur* $\mathbb{R}$.

Il n'y a pas d'extension naturelle sur $\mathbb{R}$ du problème à 2 puits symétriques. On peut toutefois (cf. Jona-Lassinio, Scoppola, Martinelli) trouver une situation très voisine, en partant du potentiel défini précédemment sur $[0, 2\Pi]$ et en le prolongeant en dehors de $[0, 2\Pi]$ de telle sorte que :

(7.1.8) $$\exists \varepsilon_0 > 0 \text{ t. q.} \qquad V(x) > \varepsilon_0 \qquad \forall x \in [0, 2\Pi] .$$

(7.1.9) $$V\left(x + \frac{2\Pi}{q}\right) = V(x) \qquad \text{pour tout} \quad x \in [a, 2\Pi + b]$$

où a est < 0 et vérifie $d_V(a, x_1) > \dfrac{d_V(x_1, x_2)}{2}$

$$b \text{ vérifie } b + \frac{2\Pi}{q} > 0 \quad \text{et} \quad d_V[2\Pi + b, x_q] > \frac{d_V(x_1, x_2)}{2} .$$

$q = 3$

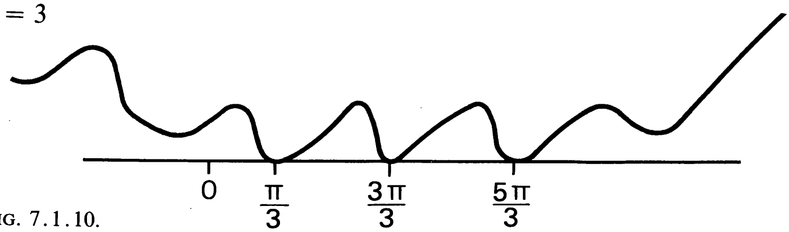


FIG. 7.1.10.

Alors les problèmes de Dirichlet que l'on peut attacher à chaque puits donnent les mêmes valeurs propres si on se pose le problème de Dirichlet dans des boules t. q. $d_V(x_i, x) < \frac{S_0}{2} + \eta_0$ où η_0 est choisi > 0 assez petit de telle sorte que (7.1.9) soit vérifiée dans la réunion de ces boules et que la translation de $\frac{2\Pi}{q}$ envoie $B_V\left(x_i, \frac{S_0}{2} + \eta_0\right)$ sur $B\left(x_{i+1}, \frac{S_0}{2} + \eta_0\right)$ pour $i = 1, \ldots, q$.

Alors :

(7.1.11) Modulo une erreur de $\tilde{\mathcal{O}}_q\left(e^{-\frac{[S_0 + 2\eta_0]}{h}}\right)$, les valeurs propres de $P(h)$ sont déterminées par

$$\mu_k(h)\mathrm{I}d + \tilde{\alpha}_k(h)\begin{pmatrix} 0 & 1 & & \bigcirc \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ \bigcirc & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

où $\mu_k(h)$ est la $k^{\text{ième}}$ valeur propre du problème de Dirichlet dans $B_V\left(x_1, \frac{S_0}{2} + \eta_0\right)$ et

$$\tilde{\alpha}_k(h) = \alpha_k(h)[1 + O(h)] \quad \text{(cf. 7.1.7)}.$$

Un petit calcul montre les valeurs propres de la matrice

$$\mathcal{J}_{(q)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \bigcirc \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ \bigcirc & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

définie par $\quad j_{i,j}^{(q)} = 0 \quad$ si $\quad |i-j| \neq 0$

$\qquad\qquad\qquad = 1 \quad$ si $\quad |i-j| = 1$

sont données par :

(7.1.12) $\quad v_l^{(q)} = 2\cos\left(\frac{l\Pi}{q+1}\right) \quad$ pour $\quad l = 1, \ldots, q$.

En particulier, les racines sont simples et on a donc finalement :

P(h) a q valeurs propres proches de $\mu(h)$ t. q. :

$$(7.1.13)\quad \begin{cases} \lambda_l^k(h) = \mu_k(h) + 2\cos\left(\dfrac{l\Pi}{q+1}\right)[\alpha_k(h)](1+0_k^q(h)), \qquad l=1,\dots,q \\ \qquad\qquad (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{[S_0+2\eta_0]}{h}})) \\ \text{où } \alpha_k(h) \text{ est défini en (7.1.7).} \end{cases}$$

En particulier si $q = 2$, on obtient :

sur $\mathbb{R}$: $\lambda_1^k(h) = \mu_k(h) \pm \alpha_k(h)(1 + 0_k^2(h))$

alors que l'on avait

sur S^1 : $\lambda_1^k(h) = \mu_k(h) \pm 2\alpha_k(h)[1 + 0_k^2(h)]$.

Physiquement, ce phénomène s'explique par l'existence d'une double interaction sur le cercle dans le cas de 2 puits.

REMARQUE 7.1.1. — Notre choix de symétries dans le cas sur $\mathbb{R}$ est un peu arbitraire et ne contient d'ailleurs pas le cas étudié au §.1. On laisse le lecteur imaginer d'autres symétries.

Dans les sous-paragraphes suivants, nous allons troubler la belle harmonie des puits symétriques en les perturbant.

7.2. **Perturbation positive près d'un puits sur S^1.**

On introduit dans la situation considérée au §.7.1.1, une perturbation positive ΔV t. q.

$$(7.2.1)\quad \begin{cases} d\,[\operatorname{Supp}\Delta V, x_1] < \dfrac{S_0}{2}, \quad d\,[\operatorname{Supp}\Delta V, x_2] > \dfrac{S_0}{2}, \\ \qquad\qquad d\,[\operatorname{Supp}\Delta V, x_q] > \dfrac{S_0}{2}, \\ \Delta V \geqslant 0, \qquad \Delta V \not\equiv 0. \end{cases}$$

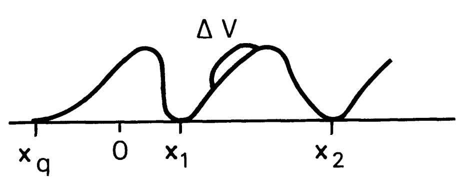


FIG. 7.2.1.

et on cherche les valeurs propres de $P_t = -h^2\Delta + V + t\Delta V$ (cf. §.6).

La matrice définissant le décalage est modifiée pour 2 raisons. D'une part, les valeurs propres associées aux problèmes de Dirichlet dans les puits $\{x_1\}$,

$\{x_2\}$, $\{x_q\}$ sont modifiées, de manière beaucoup plus sensible dans le puits $\{x_1\}$; d'autre part, la matrice W^t est modifiée. Tout est finalement dicté, pour une perturbation de $t\Delta V$, par la matrice :

$$\text{(7.2.2)}\qquad A_k^t = \begin{pmatrix} \mu_k^{t,1} & \beta_k^t & 0 & \dots & 0 & \gamma_q^t \\ \beta_k^t & \mu_k^{t,2} & \delta_k^t & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \delta_k^t & \mu_k^0 & \alpha_k & \dots & 0 \\ \vdots & & \alpha_k & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & \ddots & \alpha_k & \\ \vdots & & & \alpha_k & \mu_k^0 & \varepsilon_k^t \\ \gamma_k^t & 0 & \dots & 0 & \varepsilon_k^t & \mu_k^{t,q} \end{pmatrix} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2S_0}{h}})$$

pour $t \in]-e^{-\varepsilon_0/h}, 1]$

où

$$\text{(7.2.3)}\qquad \mu_k^{t,1}(h) = \mu_k^0(h) + t[((\Delta V)\varphi_1^0, \varphi_1^0)][1 + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\varepsilon_0/2h})] \quad \text{si} \quad |t| \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}.$$

$$\text{(7.2.4)}\qquad \mu_k^{1,1}(h) \geqslant \mu_k^0(h) + e^{-\varepsilon/h}[((\Delta V)\varphi_1^0, \varphi_1^0)], \qquad \forall \varepsilon > 0.$$

$$\text{(7.2.5)}\qquad \mu_k^{t,l} = \mu_k^0(h) \quad \text{modulo} \quad |t|\,\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2L_l/h})$$

où $\quad L_l = d_V[x_l, \operatorname{supp} \Delta V] \quad$ pour $\quad l = 2 \quad$ ou $\quad q$.

$$\text{(7.2.6)}\qquad \beta_k^t \text{ est de l'ordre de } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{1}{h}d_{V+t\Delta V}(x_1,x_2)}).$$

$$\text{(7.2.7)}\qquad \gamma_k^t \text{ est de l'ordre de } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{1}{h}d_{V+t\Delta V}(x_1,x_2)}).$$

$$\text{(7.2.8)}\qquad \delta_k^t - \alpha_k = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{d_V[x_2,x_3]}{h} - \frac{d_V[x_2,\operatorname{Supp}\Delta V]}{h}}).$$

$$\text{(7.2.9)}\qquad \varepsilon_k^t - \alpha_k = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{d_V[x_{q-1},x_q]}{h} - \frac{d_V[x_q,\operatorname{Supp}\Delta V]}{h}}).$$

Discussion pour $t = 1$.

Posons $\tilde{S}_0 = \inf\,[2S_0, S_1]$ où $S_1 = \inf\,[d_{V+\Delta V}[x_1, x_2], d_{V+\Delta V}[x_1, x_q]]$.

On peut utiliser le lemme de l'appendice pour comparer les valeurs propres de A_k^1 et celles de

$$\begin{pmatrix} \mu_k^{1,1} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \mu_k^{1,2} & \delta_k^1 & \dots & 0 \\ 0 & \delta_k^1 & \mu_k^0 & \alpha_k & \\ & & \alpha_k & \ddots & \ddots \\ & & & \mu_k^0 & \varepsilon_k^1 \\ 0 & 0 & \dots 0 & \varepsilon_k^1 & \mu_k^{1,q} \end{pmatrix}$$

Il existe une bijection b du spectre de la 2[ième] sur celui de A_k^1 telle que

$$| b(\lambda) - \lambda | = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2S_0}{h} + \frac{2L_1}{h}}\right) \qquad \text{où} \qquad L_1 = d_V(x_1, \operatorname{Supp} \Delta V) .$$

Modulo $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h + 2L_1/h})$, les valeurs propres du problème sont donc : $\mu_k^{1,1}(h)$ et les valeurs propres de la matrice :

$$\begin{pmatrix} \mu_k^{1,2}(h) & \delta_k^1 & & & & \\ \delta_k^1 & \mu_k^0(h) & \alpha_k & & \bigcirc & \\ & \alpha_k & \mu_k^0(h) & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \alpha_k & \\ & \bigcirc & & \alpha_k & \mu_k^0(h) & \varepsilon_k^1 \\ & & & & \varepsilon_k^1 & \mu_k^{1,q}(h) \end{pmatrix}$$

où encore celles de la matrice (cf. 7.1.12 pour la définition).

$$\mu_k^0(h) \mathrm{Id}_{q-1} + \alpha_k \mathcal{J}_{(q-1)}$$
$$\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2S_0}{h} + \frac{L_1}{h}}\right) + \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{S_0}{h} - \frac{L_2}{h}}\right) + \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{S_0}{h} - \frac{L_q}{h}}\right)$$
$$+ \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2L_2}{h}}\right) + \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2L_q}{h}}\right)$$

où $L_l = d[x_l, \operatorname{Supp} \Delta V]$.

On a ainsi la proposition suivante :

PROPOSITION 7.2.1. — *Soit $q > 3$. Les valeurs propres situées exponentiellement proches de la k[ième] valeur propre $\mu_k^0(h)$ du problème de Dirichlet relatif à un puits non perturbé sont simples et données par :*

$$\lambda_1^k(h) \equiv \mu_k^{1,1}(h) \quad \text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2S_0}{h} + \frac{2L_1}{h}}\right) \tag{7.2.10}$$

(valeur propre pour le problème de Dirichlet relatif au puits perturbé $\{ x_1 \}$).

$$\lambda_p^k(h) \equiv \mu_k^0(h) + 2 \cos \left[\frac{(p-1)\Pi}{q}\right] \alpha_k(h), \qquad p = 2, \ldots, q \tag{7.2.11}$$
$$\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2L_2}{h}}\right) + \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{2L}{h}}\right).$$

Discussion pour $| t | \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}$ avec $\varepsilon_0 > 0$, $\varepsilon_0 + 2L_1 < S_0$.

On se contentera de regarder le cas où $q = 3$. Malheureusement, le fait que pour $t = 0$, on ait une *vraie* racine double rend la discussion précédente insuffisante car le terme $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})$ nous gêne.

On procède donc ainsi. Soit A_t la matrice de $[-h^2\Delta + V + t\Delta V]$ restreinte à l'espace propre F_t dans la base orthonormalisée adaptée. En s'appuyant sur les résultats du §.2 et sur les formules (5.2.1) à (5.2.5), on vérifie (cf. Appendice 2) que :

$$A_t^{(k)} = A_0 + |t|.\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/h}) + \begin{pmatrix} \mu_k^{t,1} - \mu_k^0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{7.2.12}$$

Compte tenu de la symétrie du problème pour $t = 0$, on a :

$$A_0^{(k)} = \begin{pmatrix} \tilde{\mu}_k^0 & \tilde{\alpha}_k & \tilde{\alpha}_k \\ \tilde{\alpha}_k & \tilde{\mu}_k^0 & \tilde{\alpha}_k \\ \tilde{\alpha}_k & \tilde{\alpha}_k & \tilde{\mu}_k^0 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \tilde{\mu}_k^0 - \mu_k^0 = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}) \\ \tilde{\alpha}_k - \alpha_k = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h}). \end{cases}$$

Tout est donc dicté modulo $|t|\,\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/h})$ par la matrice :

$$\mu_k^0 \mathrm{Id} + \begin{pmatrix} \mu_k^{t,1} - \mu_k^0 & \tilde{\alpha}_k & \tilde{\alpha}_k \\ \tilde{\alpha}_k & 0 & \tilde{\alpha}_k \\ \tilde{\alpha}_k & \tilde{\alpha}_k & 0 \end{pmatrix} \tag{7.2.13}$$

Considérons la matrice :

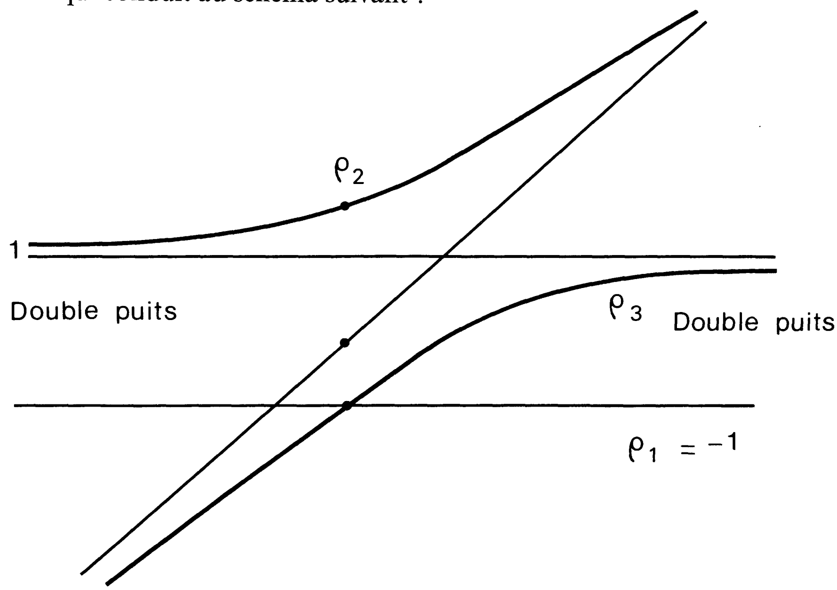
$$\begin{pmatrix} s & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

A renormalisation près et compte tenu du fait que $\dfrac{\mu_k^{t,1} - \mu_k^0}{t} = \delta_t$ est « plus ou moins » constant par rapport à t, la variation des 3 valeurs propres de cette matrice s passe de $-\infty$ à $+\infty$ décrira le phénomène.

Un calcul simple montre qu'on a 3 valeurs propres :

$$\begin{cases} \rho_1 = -1 \\ \rho_2 = \dfrac{1}{2}(s + 1 + \sqrt{8 + (s-1)^2} \\ \rho_3 = \dfrac{1}{2}(s + 1 - \sqrt{8 + (s-1)^2}\,. \end{cases} \tag{7.2.14}$$

Ce qui conduit au schéma suivant :



On retrouve pour $s = 0$ les valeurs propres $-1, -1, 2$ et pour $|s|$ grand le résultat antérieur.

Notons que :

$$\left\{\begin{array}{ll} \rho_2(s) = 2 + \dfrac{2}{3}s + 0(s^2) & s \to 0 \\ \dfrac{\rho_2(s)}{s} \to 1, & s \to \infty \\ \rho_2(s) \to 1, & s \to -\infty . \end{array}\right. \tag{7.2.15}$$

$$\left\{\begin{array}{ll} \rho_3(s) = -1 + \dfrac{1}{3}s + 0(s^2) & s \to 0 \\ \rho_3(s) \to 1 & s \to +\infty \\ \dfrac{\rho_3(s)}{s} \to 1 & s \to -\infty . \end{array}\right. \tag{7.2.16}$$

On obtient ainsi pour les valeurs propres de A_t les formules :

$$\left\{\begin{array}{ll} \lambda_1^t = \tilde{\mu}_k^0 - \tilde{\alpha}_k & \text{modulo } (|t|\,\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/h})) \\ \lambda_2^t = \tilde{\mu}_k^0 + \tilde{\alpha}_k . \rho_2\left[\dfrac{\mu_k^{t,1} - \mu_k^0}{\tilde{\alpha}_k}\right] & \text{modulo } (|t|\,\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/h})) \\ \lambda_3^t = \tilde{\mu}_k^0 + \tilde{\alpha}_k . \rho_3\left[\dfrac{\mu_k^{t,1} - \mu_k^0}{\tilde{\alpha}_k}\right] & \text{modulo } (|t|\,\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/h})) . \end{array}\right. \tag{7.2.17}$$

On vérifie que, même pour $|t|$ *très petit*, les perturbations ne perturbent pas le phénomène décrit dans la figure tant que $|t| \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}$ avec $\varepsilon_0 + 2L_1 < S_0$.

7.3. **Perturbation négative entre deux puits.**

On garde les hypothèses du §.7.1.1, mais on suppose de plus que :

(7.3.1) $$V\left(\frac{2\Pi}{q} + \theta\right) = V\left(\frac{2\Pi}{q} - \theta\right) \quad \text{et} \quad q \geqslant 3.$$

$q = 3$

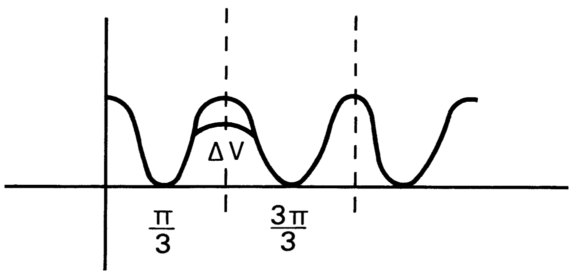


FIG. 7.3.1.

On considère ici une perturbation ΔV vérifiant :

(7.3.2) $$\begin{cases} \Delta V \in C_0^\infty, & \operatorname{supp} \Delta V \subset \left]\frac{\Pi}{q}, \frac{3\Pi}{q}\right[\\ \Delta V \leqslant 0, & \Delta V\left[\frac{2\Pi}{q} + \theta\right] = \Delta V\left[\frac{2\Pi}{q} - \theta\right] \\ V \not\equiv 0, & (V + \Delta V)(x) = 0 \Rightarrow x = x_i \quad (i = 1, \ldots, q). \end{cases}$$

On a ainsi perturbé un sommet entre deux puits symétriques de manière symétrique. Notons qu'on a cette fois-ci diminué la distance entre les puits x_1 et x_2 :

(7.3.3) $$d_W(x_1, x_2) < d_V(x_1, x_2) \qquad (\text{où on a posé } W = V + \Delta V).$$

On va appliquer le corollaire 2.6 du §.2. Pour cela, on répartit les puits en molécules de la manière suivante :

(7.3.4) $$\begin{cases} \mathscr{M}_1 = \{x_1\} \cup \{x_2\} \\ \mathscr{M}_2 = \{x_3\} \cup \ldots \cup \{x_q\}. \end{cases}$$

Avec les notations introduites au §.2, on a :

$$\text{(7.3.5)} \qquad \begin{cases} S_1 = d_W(x_1, x_2), & \tilde{S}_1 = d_V(x_1, x_2) \\ S_2 = \tilde{S}_2 = d_V(x_1, x_2) \\ S_0 = d_W, \quad \tilde{S}_0 = d_V . \end{cases}$$

Soit μ_k^W la valeur propre associée au problème de Dirichlet pour le puits $\{x_1\}$ perturbé (= la valeur propre pour le puits $\{x_2\}$ par symétrie).

La matrice A d'interaction est alors :

$$\text{(7.3.6)} \qquad A = \left(\begin{array}{cc|cccc} \mu_k^W & \beta_k & 0 & \dots & \dots & \gamma_k \\ \beta_k & \mu_k^W & \gamma_k & & 0 & \\ \hline 0 & \gamma_k & \mu_k^0 & \alpha_k & & 0 \\ 0 & & \alpha_k & \ddots & & \alpha_k \\ \gamma_k & 0 & 0 & & \alpha_k & \mu_k^0 \end{array}\right) + \left(\begin{array}{c|c} \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2d_W/h}) & \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(d_V+d_W)/h}) \\ \hline \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(d_W+d_V)/h}) & \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2d_V/h}) \end{array}\right)$$

où

$$\gamma_k - \alpha_k = \tilde{\mathcal{O}}\left(e^{-\frac{S_0}{h} - \frac{d[x_3, \operatorname{supp} \Delta V]}{h}}\right).$$

Les techniques de perturbations s'appliquent (lemme A1) et l'on obtient que le spectre est défini, modulo $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{1}{h}(2d_V(x_1,x_2)-2L)})$ (où $L = d(x_1, \operatorname{supp} \Delta V)$), par les valeurs propres des matrices

$$\text{(7.3.7)} \qquad A_{11} = \begin{pmatrix} \mu_k^W & \beta_k \\ \beta_k & \mu_k^W \end{pmatrix} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2d_W}{h}})$$

et

$$\text{(7.3.8)} \qquad A_{22} = \mu_k^0(h) I_{q-2} + \alpha_k(h) J_{q-2} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2d_V}{h}}).$$

Ce qui est utile ici est que nous avons obtenu grâce au corollaire 2.6 dans (7.3.8), $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2d_V/h})$ et non $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2d_W/h})$ comme on aurait eu par application de [*11*].

Pour ces 2 matrices, les écarts qui apparaissent β_k (resp. α_k) sont d'ordre $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-d_W/h})$ (resp. $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-d_V/h})$) et sont dominants par rapport à l'indétermination dans le calcul de la matrice A_{11} (resp. A_{22}).

On obtient ainsi la proposition suivante, qui précise les résultats de [*13*] :

PROPOSITION 7.3.1. — *Sous les hypothèses du §.7.1.1 + (7.3.1) et (7.3.2), les valeurs propres situées exponentiellement proches de la $k^{\text{ième}}$ valeur* *propre du problème de Dirichlet relatif à un puits non perturbé sont simples et données par :*

$$(7.3.9)\qquad \begin{cases} \lambda_1^k(h) = \mu_k^{\mathrm{W}}(h) + \beta_k \quad \left(\bmod \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{1}{h}\inf\,[2d_{\mathrm{W}},\,2d_{\mathrm{V}}-2\mathrm{L}]})\right) \\ \lambda_2^k = \mu_k^{\mathrm{W}}(h) - \beta_k \quad (\bmod\, (e^{-\frac{1}{h}\inf\,[2d_{\mathrm{W}},\,2d_{\mathrm{V}}-2\mathrm{L}]} \end{cases}$$

$$(7.3.10)\quad \lambda_p^k(h) = \mu_k^0(h) + 2\cos\left(\frac{(p-2)\Pi}{n-1}\right)\alpha_k \quad \left(\bmod \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{1}{h}[2d_{\mathrm{V}}-2\mathrm{L}]})\right)$$

pour $p = 3, \ldots, q$.

Autrement dit, sous l'influence de la perturbation, le problème se décompose en la somme directe d'un problème de double puits et d'un problème à $(q-2)$ *puits.* ■

7.4. Perturbation positive dans 2 puits non consécutifs sur 4 puits.

Pour donner un avant-goût des résultats du 3[e] article [*12*], nous présentons un exemple d'interaction à travers des puits faiblement résonnants.

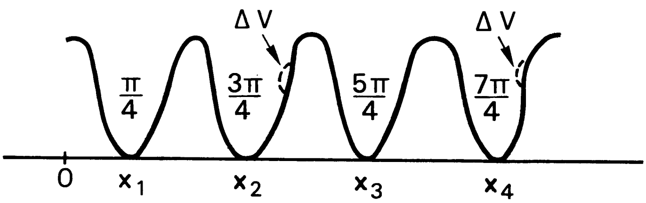


FIG. 7.4.1.

On suppose ici que :

$$(7.4.1)\qquad \begin{cases} \Delta\mathrm{V} \in \mathrm{C}_0^\infty, \quad \Delta\mathrm{V} \geqslant 0, \quad \Delta\mathrm{V} \not\equiv 0 \\ \mathrm{Supp}\,\Delta\mathrm{V} \subset \left]\frac{3\Pi}{4}, \frac{5\Pi}{4}\right[\cup \left]\frac{7\Pi}{4}, \frac{9\Pi}{4}\right[, \quad d[x_2, \mathrm{Supp}\,\Delta\mathrm{V}] < \frac{\mathrm{S}_0}{2}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad d(x_3, \mathrm{Supp}\,\Delta\mathrm{V}) > \frac{\mathrm{S}_0}{2}, \\ \Delta\mathrm{V}(\theta + \Pi) = \Delta\mathrm{V}(\theta). \end{cases}$$

Le potentiel : $\mathrm{W} = (\mathrm{V} + \Delta\mathrm{V})$ conserve donc une symétrie donnée par :

$$(7.4.2)\qquad \mathrm{W}(\theta + \Pi) = \mathrm{W}(\theta).$$

On regroupe cette fois-ci les puits en 2 molécules déduites l'une de l'autre par translation de Π.

(7.4.3) $$\mathcal{M}_1 = \{ x_1 \} \cup \{ x_2 \} .$$

(7.4.4) $$\mathcal{M}_2 = \{ x_3 \} \cup \{ x_4 \} .$$

On désigne par $\mu_k^1(h)$ (resp. $\mu_k^2(h)$) la $k^{\text{ième}}$ valeur propre du problème de Dirichlet attachée au puits $\{ x_1 \}$ (resp. $\{ x_2 \}$).

Comme on l'a déjà vu (th. 5.4.3), on a :

(7.4.5) $$\mu_k^2(h) - \mu_k^1(h) \geqslant e^{-\frac{2L}{h}-\frac{\varepsilon}{h}}, \qquad \forall \varepsilon > 0, \qquad \forall k \in \,]0, h(\varepsilon)[$$

où $$L = d_V(x_2, \text{supp } \Delta V) .$$

Il résulte alors du corollaire (2.6) que les 4 valeurs propres voisines de $\mu_k^0(h)$ sont déterminées par :

$$A = \begin{pmatrix} \mu_k^1(h) & \tilde{\alpha}_k & 0 & \beta_k \\ \tilde{\alpha}_k & \mu_k^2(h) & \beta_k & 0 \\ 0 & \beta_k & \mu_k^1(h) & \tilde{\alpha}_k \\ \beta_k & 0 & \tilde{\alpha}_k & \mu_k^2(h) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) & \mathcal{O}(e^{-\frac{(S_0+\tilde{S}_0)}{h}}) \\ \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{(S_0+\tilde{S}_0)}{h}}) & \mathcal{O}(e^{-\frac{2S_0}{h}}) \end{pmatrix}$$

où

(7.4.6) $$\tilde{\alpha}_k - \alpha_k = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}-\frac{d[x_2, \text{supp } \Delta V]}{h}}) .$$

(7.4.7) $$\begin{cases} S_0 = d_V(x_1, x_2) = d_W(x_1, x_2) \\ \tilde{S}_0 = d_W(x_2, x_3) > S_0 \end{cases}$$

(7.4.8) $$\begin{cases} e^{-\frac{S_0}{h}-\frac{\varepsilon}{h}} \leqslant | \tilde{\alpha}_k(h) | \leqslant e^{-\frac{S_0}{h}+\frac{\varepsilon}{h}} \\ e^{-\frac{\tilde{S}_0}{h}-\frac{\varepsilon}{h}} \leqslant | \tilde{\beta}_k(h) | \leqslant e^{-\frac{\tilde{S}_0}{h}+\frac{\varepsilon}{h}} . \end{cases}$$

Notons que l'on a toujours $\tilde{\alpha}_k . \tilde{\beta}_k > 0$.

Suivant la parité de k, α_k et β_k peuvent être négatifs mais toujours de même signe.

De plus si on écrit A en blocs moléculaires, on a :

(7.4.9) $$\begin{cases} A_{11} = A_{22} = {}^tA_{11} = {}^tA_{22} \\ A_{12} = A_{21} = {}^tA_{12} = {}^tA_{21} \qquad \text{(provient des symétries)} . \end{cases}$$

Les erreurs modulo $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})$ ne pouvant être négligé *a priori*, on réécrit A sous la forme :

$$(7.4.10)\qquad A = \begin{pmatrix} \tilde{\mu}_k^1(h) & \tilde{\tilde{\alpha}}_k & 0 & \beta_k \\ \tilde{\tilde{\alpha}}_k & \tilde{\mu}_k^2(h) & \beta_k & 0 \\ 0 & \beta_k & \tilde{\mu}_k^1(h) & \tilde{\alpha}_k \\ \beta_k & 0 & \tilde{\alpha}_k & \tilde{\mu}_k^2(h) \end{pmatrix} \bmod \tilde{\mathcal{O}}(e^{-(S_0+\tilde{S}_0)/h}).$$

On a ici utilisé les propriétés de symétries du reste dans (7.4.6) et on a :

$$(7.4.11)\qquad \begin{cases} \tilde{\tilde{\alpha}}_k = \alpha_k & (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})) \\ \tilde{\mu}_k^i = \mu_k^i & (\text{modulo } \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})) \end{cases}$$

de sorte que, l'on a :

$$(7.4.12)\qquad \tilde{\mu}_k^2(h) - \tilde{\mu}_k^1(h) \geqslant e^{-2L/h-\varepsilon/h}.$$

Notons que le lemme A.1.1 s'applique à partir de (7.4.6) mais donne seulement :

$$(7.4.13)\qquad \begin{cases} \lambda_k^1(h) = \mu_k^1(h) & \bmod \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2S_0-2L]/h}) \\ \lambda_k^2(h) = \mu_k^1(h) & \bmod \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2S_0-2L]/h}) \\ \lambda_k^3(h) = \mu_k^2(h) & \bmod \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2S_0-2L]/h}) \\ \lambda_k^4(h) = \mu_k^2(h) & \bmod \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2S_0-2L]/h}) \end{cases}$$

Modulo $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-[2S_0-2L]/h})$, on a donc 2 valeurs propres doubles. Ce résultat n'est que partiellement satisfaisant car on ne sait pas si ces valeurs propres sont réellement doubles ou seulement asymptotiquement doubles. C'est que notre premier calcul ne tient pas compte des effets tunnels entre les puits $\{x_1\}$ et $\{x_3\}$ ou $\{x_2\}$ et $\{x_4\}$.

Considérons donc la matrice :

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mu}_k^1(h) & \tilde{\tilde{\alpha}}_k & 0 & \beta_k \\ \tilde{\tilde{\alpha}}_k & \tilde{\mu}_k^2(h) & \beta_k & 0 \\ 0 & \beta_k & \tilde{\mu}_k^1(h) & \tilde{\alpha}_k \\ \beta_k & 0 & \tilde{\alpha}_k & \tilde{\mu}_k^2(h) \end{pmatrix}$$

Posant
$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_k^2 - \tilde{\mu}_k^1 &= \sigma \\ \tilde{\alpha} &= \rho \\ \beta_k &= \tau \end{aligned}$$

on est ramené, après changement de base, à l'étude de la matrice :

$$(7.4.14) \qquad Q_{\rho,\tau,\sigma} = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & \rho & \tau \\ 0 & 0 & \tau & \rho \\ \hline \rho & \tau & \sigma & 0 \\ \tau & \rho & 0 & \sigma \end{array}\right)$$

dont les racines sont :

$$(7.4.15) \qquad \begin{cases} \nu_1(\rho, \tau, \sigma) = \dfrac{\sigma}{2} - \sqrt{\dfrac{\sigma^2}{4} + (\rho - \tau)^2} \\ \nu_2(\rho, \tau, \sigma) = \dfrac{\sigma}{2} - \sqrt{\dfrac{\sigma^2}{4} + (\rho + \tau)^2} \\ \nu_3(\rho, \tau, \sigma) = \dfrac{\sigma}{2} + \sqrt{\dfrac{\sigma^2}{4} + (\rho + \tau)^2} \\ \nu_4(\rho, \tau, \sigma) = \dfrac{\sigma}{2} + \sqrt{\dfrac{\sigma^2}{4} + (\rho - \tau)^2}. \end{cases}$$

Revenant aux valeurs propres de C, on a donc :

$$(7.4.16) \qquad \left.\begin{cases} \lambda_k^1(h) = \tilde{\mu}_k^1(h) + \nu_1(\beta_k, \tilde{\tilde{\alpha}}_k, \tilde{\mu}_k^2 - \tilde{\mu}_k^1) \\ \lambda_k^2(h) = \tilde{\mu}_k^1(h) + \nu_2(\beta_k, \tilde{\tilde{\alpha}}_k, \tilde{\mu}_k^2 - \tilde{\mu}_k^1) \\ \lambda_k^3(h) = \tilde{\mu}_k^1(h) + \nu_3(\beta_k, \tilde{\tilde{\alpha}}_k, \tilde{\mu}_k^2 - \tilde{\mu}_k^1) \\ \lambda_k^4(h) = \tilde{\mu}_k^1(h) + \nu_4(\beta_k, \tilde{\tilde{\alpha}}_k, \tilde{\mu}_k^2 - \tilde{\mu}_k^1) \end{cases}\right. \mod \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0 + \tilde{S}_0}{h}}).$$

On va maintenant analyser les développements des $\nu_i(\tau, \rho, \sigma)$ en tenant compte du fait que : $\tau \ll \rho \ll \sigma$.

Si l'on observe que :

$$\sqrt{\frac{\sigma^2}{4} + (\rho+\tau)^2} - \sqrt{\frac{\sigma^2}{4} + (\rho-\tau)^2} = \frac{4\rho\tau}{\sqrt{\dfrac{\sigma^2}{4} + (\rho+\tau)^2} + \sqrt{\dfrac{\sigma^2}{4} + (\rho-\tau)^2}} \approx \frac{4\rho\tau}{\sigma}$$

on obtient :

$$(7.4.17) \qquad \begin{cases} \lambda_k^1(h) - \lambda_k^2(h) = (1 + \tilde{\mathcal{O}}(h))\dfrac{4\rho\tau}{\sigma} \quad (\mathrm{mod}\ \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[S_0 + \tilde{S}_0]/h})) \\ \lambda_k^3(h) - \lambda_k^4(h) = (1 + \tilde{\mathcal{O}}(h))\dfrac{4\rho\tau}{\sigma} \quad (\mathrm{mod}\ \tilde{\mathcal{O}}(e^{-[S_0 + \tilde{S}_0]/h})). \end{cases}$$

Or on a :

$$(7.4.18) \qquad \begin{cases} e^{-\frac{1}{h}[S_0 + \tilde{S}_0 - 2L + \varepsilon]} \leqslant \left|\dfrac{\rho\tau}{\sigma}\right| \leqslant e^{-\frac{1}{h}[S_0 + \tilde{S}_0 - 2L - \varepsilon]} \\ \forall \varepsilon > 0, \qquad \forall h \in]0, h(\varepsilon)[. \end{cases}$$

Le décalage observé en (7.4.17) est donc *significatif* par rapport au terme d'erreur $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-[S_0+\tilde{S}_0]/h})$.

On obtient finalement la proposition :

PROPOSITION 7.4.1. — *Sous les hypothèses du §.7.1.1 + (7.4.1), les 4 valeurs propres situées près de $\mu_k^0(h)$ ($k^{\text{ième}}$ valeur propre du problème de Dirichlet relative à un puits non perturbé) sont* distinctes *et vérifient (7.4.12), (7.4.16) et (7.4.17).*

REMARQUE 7.4.2. — L'effet tunnel observé en (7.4.17) est d'un ordre nettement plus faible que celui observé dans le cas du double puits, mais il est de l'ordre de $\dfrac{e^{-d_V+\Delta V(x_1,x_3)/h}}{|\mu_k^2(h)-\mu_k^1(h)|}$.

On montrera dans [*12*] des effets plus faibles encore dans le cas non-résonnant.

7.5. **Perturbation du puits médian pour un système de 3 puits sur $\mathbb{R}$.**

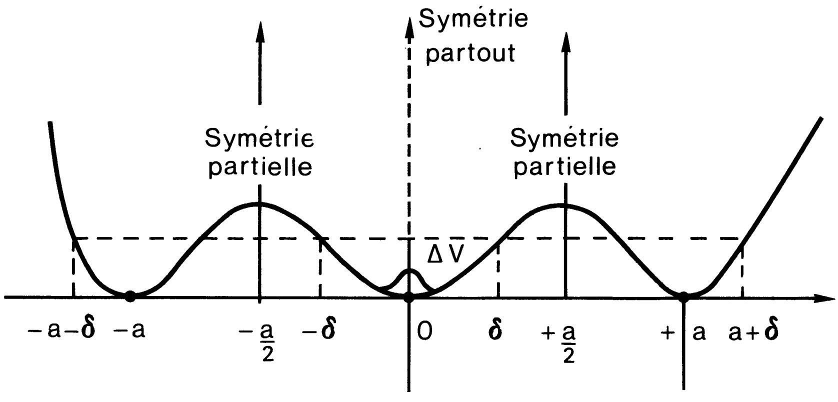


FIG. 7.5.1.

On considère l'équation de Schrödinger pour un potentiel V(x) défini sur $\mathbb{R}$ et possédant les propriétés correspondant au dessin, c. à. d. :

$$(7.5.2)\qquad \begin{cases} V\in C^\infty, \quad \lim\limits_{|x|\to+\infty} V>0, \quad V(x)=V(-x) \\ V(x)=0 \Leftrightarrow x=a, \quad 0 \text{ et } -a \\ V''(a)\neq 0 \\ \exists\delta>0 \text{ t. q. } V\left[-\dfrac{a}{2}+y\right]=V\left[-\dfrac{a}{2}-y\right] \\ \qquad \text{pour } |y|\leqslant\dfrac{a}{2}+\delta. \end{cases}$$

$$(7.5.3)\quad \begin{cases} \text{Soit } t\,.\,\Delta V \text{ une perturbation } (\,|\,t\,|\leqslant e^{-\varepsilon_0/h}) \text{ où supp } \Delta V \subset\,]-\varepsilon_1, \varepsilon_1[\\ \text{avec } \varepsilon_1 < +\frac{a}{2},\ \Delta V \geqslant 0,\ \Delta V \equiv 0,\ \Delta V(-x) = \Delta V(x) \text{ et } \Delta V(0) > 0. \end{cases}$$

et on considère le problème de la variation des valeurs propres (quand t varie) exponentiellement proches de la $k^{\text{ième}}$ valeur propre relative au puits $\{ a \}$. On oublie dans la suite la référence à k et soient $\mu^{(t)}_{-a}$, $\mu^{(t)}_0$, $\mu^{(t)}_a$ les valeurs propres obtenues pour les valeurs propres attachées au problème de Dirichlet de chaque puits.

Notons que par symétrie un bon choix des problèmes de Dirichlet assure que :

$$(7.5.4)\qquad \mu^{(t)}_{-a} = \mu^{(t)}_a$$

et d'autre part, on a les propriétés suivantes

$$(7.5.5)\qquad \begin{aligned} \frac{\mu^{(t)}_{-a} - \mu^{(0)}_{-a}}{t} &\approx (\Delta V \varphi^0_{-a}, \varphi^0_{-a}) \approx \mathcal{O}(e^{-\frac{2d[-a,\,\mathrm{supp}\,\Delta V]}{h}}) \\ &\approx \mathcal{O}(e^{-2(S_0-\varepsilon_1)/h}) \qquad (\text{cf. } 5.2.26) \end{aligned}$$

$$(7.5.6)\qquad \frac{\mu^{(t)}_0 - \mu^{(t)}_0}{t} \approx (\Delta V\,.\,\varphi^0_0, \varphi^0_0)\,.$$

$$(7.5.7)\qquad \mu^{(0)}_0 - \mu^{(0)}_{-a} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2d[0,\delta]}{h}})$$

$\left(\alpha \approx \beta \text{ signifie que } \frac{\alpha}{\beta} \text{ et } \frac{\beta}{\alpha} \text{ sont } \mathcal{O}_\varepsilon(e^{\varepsilon/h}),\ \forall \varepsilon > 0\right)$.

Pour voir tous les cas intéressants, on suppose que :

$$(7.5.8)\qquad \varepsilon_0 < 2d\,[0, \delta\,]$$

de sorte que :

$$(7.5.9)\quad \begin{cases} \mu^{(0)}_{-a} - \mu^{(t)}_0 = \mu^{(0)}_{-a} - \mu^{(0)}_0 + (\mu^{(t)}_{-a} - \mu^{(0)}_{-a}) - (\mu^{(t)}_0 - \mu^{(0)}_0) \\ \qquad = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2d[0,\delta]/h}) \\ \qquad - t[(\Delta V \varphi^0_0, \varphi^0_0) + \mathcal{O}(h)] \end{cases}$$

change de signe lorsque t varie de $-\,e^{-\varepsilon_0/h}$ vers $+\,e^{-\varepsilon_0/h}$.

Écrivons maintenant la matrice d'interaction C_t. Elle est de la forme :

$$(7.5.10)\qquad C_t = \begin{pmatrix} \mu^{(t)}_{-a} & \beta^t & 0 \\ \beta^t & \mu^{(t)}_0 & \beta^t \\ 0 & \beta^t & \mu^{(t)}_0 \end{pmatrix} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})$$

où on a de nouveau utilisé quelques propriétés de symétrie de C_t pour préciser sa forme.

Notons que :

$$\beta_t = \beta_0[1 + 0(h^\infty)]$$

et

(7.5.11) $e^{-\frac{S_0}{h}-\frac{\varepsilon}{h}} \leqslant \beta_t \leqslant e^{-S_0+\frac{\varepsilon}{h}}$ $\forall \varepsilon > 0$, $\forall h \leqslant h(\varepsilon)$, $\forall t$, $|t| \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}$.

On réécrit C_t sous la forme :

(7.5.12) $$C_t = \mu_a^{(t)} \mathrm{I}d + \beta_t \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & s & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{S_0}{h}})\right]$$

avec $$s = \frac{\mu_{-a}^{(t)} - \mu_0^{(t)}}{\beta_t}.$$

Lorsque t varie de $-\mathrm{e}^{-\varepsilon_0/h}$ à $+e^{-\varepsilon_0/h}$, s varie puisque $\Delta V > 0$, d'après (7.5.9), de $-|\tilde{\mathcal{O}}(e^{\frac{S_0-\varepsilon_0}{h}})|$ à $|\tilde{\mathcal{O}}(e^{\frac{S_0-\varepsilon_0}{h}})|$.

Tout est donc dicté par la variation par rapport à s des valeurs propres de

(7.5.13) $$D(s) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & s & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

pour $-e^{\left(\frac{S_0-\varepsilon_0}{h}+\frac{\varepsilon}{h}\right)} < s < e^{\frac{S_0-\varepsilon_0}{h}+\frac{\varepsilon}{h}}$, $\varepsilon > 0$ *sous réserve que dans cette zone les écarts observés soient d'ordre dominant par rapport à* $e^{-S_0/h}$.

$D(s)$ admet 3 valeurs propres

(7.5.14) $$\begin{cases} \nu_1 = 0 \\ \nu_2 = \dfrac{s}{2} + \sqrt{\dfrac{s^2}{2} + 2} \\ \nu_3 = \dfrac{s}{2} - \sqrt{\dfrac{s^2}{4} + 2} \end{cases}$$

correspondant au schéma p. 208.

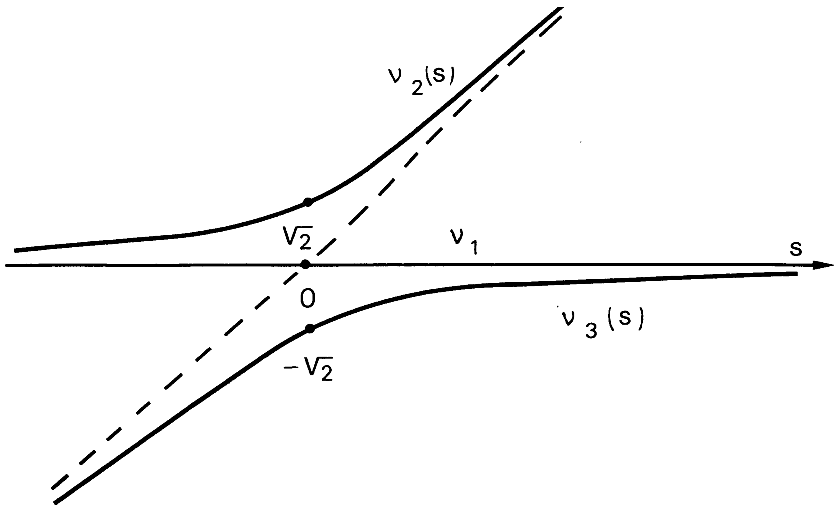
Clairement $\nu_2 - \nu_3 \geqslant 2\sqrt{2}$, $\forall s$.

$$\nu_2(s) = -\nu_3(-s)$$

$$\frac{\nu_2(s)}{s} \to 1, \qquad s \to +\infty .$$

$\nu_2(s)$ est croissante et $\nu_2(s) = \dfrac{2}{|s|} + \mathcal{O}\left(\dfrac{1}{|s|^2}\right)$, $s \to -\infty$, en particulier :

$$|\nu_2(s)| \geqslant \frac{3}{2|s|}$$



et, pour $s_{h,\varepsilon} = -e^{\left(\frac{S_0-\varepsilon_0}{h}\right)+\frac{\varepsilon}{h}}$, ceci implique :

$$| \nu_2(s_{h,\varepsilon}) | \geqslant \frac{3}{2} \cdot e^{-\frac{[S_0-\varepsilon_0]}{h}-\frac{\varepsilon}{h}}$$

ce qui est significatif devant l'erreur $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-S_0/h})$.

$$(7.5.15)\quad \begin{cases} \text{On a ainsi montré :} \\ \text{Pour tout } s \in \left]-e^{\left(\frac{S_0-\varepsilon_0}{h}+\frac{\varepsilon}{h}\right)}, e^{\frac{S_0-\varepsilon_0}{h}}\right[\text{ et tout } h \text{ assez petit, on a :} \\ \qquad \inf\limits_{i \neq j} | \nu_i(s) - \nu_j(s) | \geqslant \frac{3}{2} e^{-\frac{[S_0-\varepsilon_0]}{h}-\frac{\varepsilon}{h}}. \end{cases}$$

Remarquons également que :

$$(7.5.16)\qquad \nu_2\nu_3 = -4 \quad (\text{cste}).$$

On peut résumer les résultats obtenus dans la proposition suivante :

PROPOSITION 7.5.1. — *Soit* $(V + t\Delta V)$ *le potentiel défini en (7.5.2) et (7.5.3). Alors, pour* $t \in \left]-e^{-\varepsilon_0/h}, e^{\varepsilon_0/h}\right[$ *avec* ε_0 *vérifiant (7.5.8), on a exponentiellement près d'une valeur propre d'un puits, 3 valeurs propres simples données par :*

$$(7.5.17)\qquad \lambda_i^{(t)}(h) = \mu_a^{(t)}(h) + \beta_t \nu_i \left[\frac{\mu_{-a}^{(t)} - \mu_0^{(t)}}{\beta_t}\right] + \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2S_0/h})$$

où les ν_i *sont définis en (7.5.14),* β_t *vérifie (7.5.11) et* $(\mu_{-a}^{(t)} - \mu_0^{(t)})$ *est estimé en (7.5.9).*

On a de plus :

(7.5.18) $\left(\lambda_3^{(t)}(h) - \lambda_1^{(t)}(h)\right)\left(\lambda_2^{t}(h) - \lambda_1^{(t)}(h)\right) = -4\beta_0^2(1 + 0(h^\infty))$.

Nous n'avons pas d'interprétation physique de cette dernière relation.

Cas particulier : étude de $t = 0$.

On a vu en (7.5.9) que : $\mu_{-a}^{(0)} - \mu_0^{(0)} = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-2d[0,\delta]/h})$;

Supposons que :

(7.5.19) $$\mu_{-a}^{(0)} - \mu_0^{(0)} \geqslant e^{-2d[0,\delta]/h - \varepsilon/h}$$

(ce qui est le cas sur le dessin).

Alors $s = \dfrac{1}{\beta_0}\left[\mu_{-a}^{(0)} - \mu_0^{(0)}\right] \geqslant e^{(S_0 - 2d[0,\delta])/h - 2\varepsilon/h}$, $(h \leqslant h(\varepsilon))$.

Si on a peu de symétrie additionnelle, ce qui correspond au cas où :

(7.5.20) $$d[0,\delta] < \frac{S_0}{2},$$

les écarts observés sont donnés par :

(7.5.21) $$\begin{cases} \text{Si (7.5.19) et (7.5.20) sont vérifiées, on a :} \\ |\lambda_2(h) - \lambda_1(h)| \geqslant e^{-2d[0,\delta]/h - \varepsilon/h}, \qquad \forall\varepsilon > 0, \qquad \forall h < h(\varepsilon) \\ |\lambda_3(h) - \lambda_1(h)| \geqslant e^{-\frac{2S_0}{h} + \frac{2d[0,\delta]}{h} - \frac{\varepsilon}{h}}, \qquad \forall\varepsilon > 0, \qquad \forall h < h(\varepsilon). \end{cases}$$

Interprétation.

La fonction propre (pour le niveau fondamental) correspondant à $\lambda_2(h)$ est localisée au fond du puits médian et il y a un phénomène de double puits entre le puits $(-a)$ et le puits (a) correspondant aux valeurs propres λ_1 et λ_3 de l'ordre de $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2S_0}{h} + \frac{2d[0,\delta]}{h}})$ qu'on peut interpréter comme dans l'exemple du § 7.4 sous la forme : $\tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{d[-a,+a]}{h}})/(\mu_{-a}^{0} - \mu_0^{(0)})$.

Si on a plus de symétrie additionnelle, ce qui correspond au cas où :

(7.5.22) $$d(0,\delta) > \frac{S_0}{2}$$

les écarts observés sont donnés par :

(7.5.23) $$\begin{cases} \lambda_2(h) - \lambda_1(h) = \sqrt{2}\,[1 + 0(h)]\beta_0 \\ \lambda_3(h) - \lambda_1(h) = -\sqrt{2}\,[1 + 0(h)]\beta_0. \end{cases}$$

On est dans la situation du triple puits très symétrique (cf. § 7.1.2). ■

APPENDICE 1

L'objet de cet appendice est la démonstration du lemme :

Lemme A.1.1. — *Soit* $M = \begin{pmatrix} A_1 & B \\ {}^tB & A_2 \end{pmatrix}$ *une matrice réelle symétrique dans* $\mathbb{R}^N$.

On désigne par Σ_{A_j} *le spectre de* A_j.

Soit $M_0 = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}$, $S = d(\Sigma_{A_1}, \Sigma_{A_2})$; *alors si* :

$$\| B \| < \frac{1}{2} d(\Sigma_{A_1}, \Sigma_{A_2})$$

on a :

$$\sup_{\lambda \in \Sigma_M} d(\lambda, \Sigma_{M_0}) \leqslant \frac{\| B \|^2}{\frac{S}{2} + \sqrt{\frac{S^2}{4} - \| B \|^2}} \leqslant \frac{2 \| B \|^2}{S} < \frac{S}{2}.$$

Démonstration. — Soit $\mathscr{B} = \begin{pmatrix} 0 & B \\ {}^tB & 0 \end{pmatrix}$ et considérons :

$$(M - \lambda)(M_0 - \lambda)^{-1} = I - \mathscr{B}(\lambda - M_0)^{-1}.$$

Donc :

$$(M - \lambda)^{-1} = (M_0 - \lambda)^{-1}(I - \mathscr{B}(\lambda - M_0)^{-1})^{-1}$$

et la résolvante existe à condition que $\lambda \notin \Sigma_{M_0}$ et que la série de Neumann :

$$\sum_0^\infty (\mathscr{B}(\lambda - M_0)^{-1})^k$$

converge.

Cette série converge si : $\| (\mathscr{B}(\lambda - M_0)^{-1})^2 \| < 1$. Or :

$$(\lambda - M_0)^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & B(\lambda - A_2)^{-1} \\ {}^tB(\lambda - A_1)^{-1} & 0 \end{pmatrix}.$$

D'où

$$(\mathscr{B}(\lambda - M_0)^{-1})^2 = \begin{pmatrix} B(\lambda - A_2)^{-1}\,{}^tB(\lambda - A_1)^{-1} & \bigcirc \\ \bigcirc & {}^tB(\lambda - A_1)^{-1}B(\lambda - A_2)^{-1} \end{pmatrix}$$

Donc,

$$\| (\mathscr{B}(\lambda - M_0)^{-1})^2 \| \leqslant \frac{\| B \|^2}{d(\lambda, \Sigma_{A_1})d(\lambda, \Sigma_{A_2})}$$

et cette expression est strictement inférieure à 1 si $d(\lambda, \Sigma_{M_0}) \geqslant \frac{S}{2}$.

Supposons maintenant que : $d(\lambda, \Sigma_{M_0}) \leqslant \frac{S}{2}$, par exemple :

$$d(\lambda, \Sigma_{A_1}) \underset{\text{def}}{=} \mu \leqslant \frac{S}{2}$$

alors :

$$d(\lambda, \Sigma_{A_2}) \geqslant S - d(\lambda, \Sigma_{A_1}) = S - \mu$$

et

$$\| (\mathscr{B}(\lambda - M_0)^{-1})^2 \| \leqslant \frac{\| B \|^2}{\mu(S - \mu)} < 1$$

si μ vérifie :

$$\mu^2 - \mu S + \| B \|^2 < 0, \qquad \mu \leqslant \frac{S}{2}.$$

La résolvante existe donc si :

$$\mu_- < \mu \leqslant \frac{S}{2}$$

où

$$\mu_- = \frac{\| B \|^2}{\frac{S}{2} + \sqrt{\frac{S^2}{4} - \| B \|^2}}, \qquad \text{soit} \qquad d(\lambda, \Sigma_{M_0}) > \mu_- .$$

Le lemme en résulte.

COROLLAIRE A.1.2. — *Il existe une bijection b de Σ_M sur Σ_{M_0} t. q.*

$$| b(\lambda) - \lambda | \leqslant N\mu_- .$$

APPENDICE 2

PERTURBATION DANS LE CAS DE PLUSIEURS PUITS

L'objet de cet appendice est d'établir (sans démonstration) une formule de perturbation dans le cas de plusieurs puits dont un cas particulier est utilisé au §.7.2. Pour simplifier les arguments et les résultats on supposera que chaque puits U_j contribue avec au plus une valeur propre μ_j et on notera φ_j la fonction propre correspondante. On se place donc dans la situation générale décrite au §.2, mais on suppose que $m_j \leqslant 1$ dans [2.1.4]. Soit $\Delta V \in C_0^\infty(M)$ et considérons $V(t, x) = V(x) + t\Delta V(x)$. Les hypothèses générales du §.2 restent alors vérifiées si t est dans un voisinage de 0 assez petit (tendant vers 0 avec h).

Si $m_j = 1$, soit $\varphi_j(t, x) \in L^2(M_j)$ la fonction propre normalisée correspondant à $\mu_j(t) \in I(h)$. Ces deux quantités dépendent de manière C^∞ de t pour t assez voisin de 0 et l'espace F_t correspondant aux valeurs propres de $P_t = -h^2\Delta + V(t, x)$ contenues dans $I(h)$ est de dimension constante (indépendance de h et t) pour t assez voisin de 0.

Comme au paragraphe 2, on construit une base orthonormale $\vec{e}_t$ de F_t et on désigne par A_t la matrice de $P_t|_F$ dans cette base.

On obtient alors le :

THÉORÈME A.2.1. — *Pour $| t | \leqslant e^{-\varepsilon_0/h}$ avec $\varepsilon_0 > 0$, on a :*

$$\begin{aligned} A_t - A_0 &= t \operatorname{diag}\left((\varphi_j^0/\Delta V \varphi_j^0)_{L^2(M_j)}\right) \\ &\quad + t \,.\, \widetilde{\mathcal{O}}(\mathscr{D}' + \mathscr{D}'^2) \\ &\quad + t^2 \operatorname{diag}\left(\mathcal{O}_\varepsilon(e^{\varepsilon/h - 2L_j/h})\right) \end{aligned}$$

pour tout $\varepsilon > 0$, où $L_j = d_V(U_j, \operatorname{supp} \Delta V)$ et $\mathscr{D}'$ est défini en (2.1.21).

La démonstration est une variante de celle du théorème 5.2.1, combinée avec les techniques développées au paragraphe 2. On retrouve bien comme cas particulier (7.2.12).

RÉFÉRENCES

[*1*] S. AGMON, Lectures on exponential decay of solutions of second order elliptic equations, *Math. Notes*, t. **29**, Princeton University Press.

[*2*] J. M. COMBES, P. DUCLOS, R. SEILER, I. Krein's formula and one dimensional multiple wells, *J. of Functional Analysis*, t. **52**, 1983, p. 257-301. II. Convergent expansions for tunneling. *Comm. in Math. Physics*, t. **82**, 1983, p. 229-245.

[*3*] H. DONNELLY, G-spaces, the asymptotic splitting of $L^2(M)$ into irreducibles. *Math. Annalen.*, t. **237**, 1978, p. 23-40.

[*4*] Z. EL HOUAKMI, Comportement asymptotique du spectre en présence de symétries. *Thèse de 3e cycle à Nantes*, Juin 1983.

[*5*] GILDENER, PATRASCIOU, *Phys. Rev. D.*, t. **16**, n° 2, Juillet 1977.

[*6*] E. M. HARRELL, On the rate of asymptotic eigenvalue degeneracy, *Comm. Math. Phys.*, t. **60**, 1978, p. 73-95.

[*7*] E. M. HARRELL, Double wells, *Comm. Math. Phys.*, t. **75**, 1980, p. 239-261.

[*8*] B. HELFFER, D. ROBERT, *Étude du spectre pour un opérateur globalement elliptique dont le symbole de Weyl présente des symétries :*

I. Action des groupes finis (à paraître à *Amer. J. of Math.*).

II. Action des groupes compacts (Preprint).

[*9*] B. HELFFER, D. ROBERT, Calcul fonctionnel par la transformation de Mellin et opérateurs admissibles. *J. of Functional Analysis*, t. **53**, n° 3, 1983, p. 246-268.

[*10*] B. HELFFER, D. ROBERT, Puits de potentiel généralisés et asymptotique semi-classique. *Annales de l'I. H. P.*, Vol. **41**, n° 3, 1984, p. 291-331.

[*11*] B. HELFFER, J. SJÖSTRAND, Multiple wells in the semi-classical limit I. *Comm. in P.D.E.*, t. **9**, n° 4, 1984, p. 337-408.

[*12*] B. HELFFER, J. SJÖSTRAND, Multiple wells in the semi-classical limit III. Interaction through non-resonant wells (à paraître *Mathematische Nachrichte*).

[*13*] G. JONA-LASINIO, F. MARTINELLI et E. SCOPPOLA, New approach in the semi-classical limit of quantum mechanics I. Multiple tunnelings in one dimension. *Comm. Math. Phys.*, t. **80**, 1981, p. 223.

[*14*] L. LANDAU, E. LIFCHITZ, *Mécanique quantique, théorie non relativiste*, Éditions Mir, Moscou, 1966.

[*15*] MORGAN, B. SIMON, Behaviour of molecular potential energy curves for large nuclear separations, *International Journal of Quantum chemistry*, t. **XVII**, 1980, p. 1143-1166.

[*16*] M. REED, B. SIMON, *Methods of modern mathematical physics*, t. **4**, 1978, Academic Press, New York.

[*17*] J. P. SERRE, *Représentation linéaire des groupes finis* (Herman), 1967.

[*18*] B. SIMON, Semi-classical analysis of low lying eigenvalues I. *Ann. Inst. Poincaré*, t. **38**, 1983, p. 295-307.

[*19*] B. SIMON, Instantons, double wells and large deviations. *Bull. AMS.*, t. **8**, 1983, p. 323-326.

[*20*] B. SIMON, Semi-classical analysis of low lying eigenvalues II, Tunneling (*Annals of Mathematics*, 1984).

(Manuscrit reçu le 18 Juin 1984)