

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

A. MOHAMED

B. PARISSÉ

Approximation des valeurs propres de certaines perturbations singulières et application à l'opérateur de Dirac

Annales de l'I. H. P., section A, tome 56, n° 3 (1992), p. 235-277

http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1992__56_3_235_0

© Gauthier-Villars, 1992, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Annales de l'I. H. P., section A » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques

<http://www.numdam.org/>

Approximation des valeurs propres de certaines perturbations singulières et application à l'opérateur de Dirac

par

A. MOHAMED

Université de Nantes, U.F.R.-Sciences, Département de Mathématiques,
U.R.A. 758, 2, rue de la Houssinière, 44072 Nantes Cedex 03, France

et

B. PARISSÉ

Université Paris-XI, Département de Mathématiques,
Bât. 425, U.R.A. 760 CNRS, 91405 Orsay Cedex, France

RÉSUMÉ. — Nous établissons quelques résultats d'approximation de valeurs propres. Comme application, nous donnons l'écart asymptotique entre les quatre premières valeurs propres pour le problème du double puits associé à l'opérateur de Dirac, avec ou sans champ magnétique, aussi bien en limite semi-classique qu'en limite relativiste.

ABSTRACT. — We establish some results of approximation of discrete eigenvalues. As an application, we give the asymptotic behaviour of the splitting of the first four eigenvalues related to the double-well problem for the Dirac operator, with and without magnetic field, in the semiclassical limit and the relativistic one.

0. INTRODUCTION

L'étude semi-classique de l'opérateur de Schrödinger $P^h = (-ih\nabla + \vec{a}(x))^2 + V(x)$ donne lieu à un problème de perturbation singulière quand on s'intéresse à l'approximation de ses valeurs propres. La méthode B.K.W. est un outil très pratique dans ce cas comme le montrent les travaux de B. Helffer et J. Sjöstrand [HE-SJ]_{1,2,3,4} et ceux de A. Martinez [MAR]_{1,2} et [MA-RO] relatifs à des potentiels magnétique $\vec{a}(x)$ et électrique $V(x)$ réguliers. On arrive dans ce cas à avoir un développement asymptotique en puissance de h du niveau fondamental ainsi qu'une fonction propre associée. Une adaptation au cas de potentiels électriques ayant des singularités du type Coulombien a été faite par A. Mohamed [MOH], (voir aussi [CHA] pour la dimension 2).

Quand on s'intéresse à des niveaux d'énergie plus élevés, la méthode B.K.W. ne donne pas un algorithme pratique pour calculer la série en puissances de h des valeurs propres, bien qu'elle permette d'avoir d'autres renseignements bien précis, voir par exemple [MAR]₂. La méthode dite de Grushin s'est révélée utile pour des potentiels périodiques (voir [HE-SJ]₄) sans permettre un calcul aisé d'une approximation d'un niveau d'énergie donné.

La grande difficulté pour les niveaux d'énergie plus élevés est qu'ils sont dans la plupart des cas dégénérés pour l'opérateur non perturbé.

Pour l'opérateur de Dirac $\alpha \cdot (hD + \vec{a}(x)) + \beta + W(x)$, le problème est pire du fait que tous les niveaux d'énergie sont dégénérés quand il n'y a pas de champ magnétique. Les symétries de l'opérateur de Dirac sans champ magnétique permettent de résorber la dégénérescence du niveau fondamental quand le potentiel électrique est régulier. Dans ce cas le niveau fondamental est dégénéré à l'ordre deux, c'est le minimum requis par les symétries, ce qui permet à X. P. Wang [WAN] et B. Parisse [PAR] de faire fonctionner la méthode B.K.W.

Pour lever le problème de dégénérescence des valeurs propres, nous donnons au paragraphe I une méthode pratique qui permet de savoir si une branche d'un niveau donné éclate, à un ordre de puissance de h précisé, en une valeur propre simple; auquel cas nous donnons un algorithme pour calculer son développement asymptotique complet en puissance de h . Quand il y a une symétrie comme dans le cas de l'opérateur de Dirac sans champ magnétique, nous avons juste besoin de savoir que la branche de valeur propre est double au lieu de simple. Ces méthodes s'appliquent à la limite semi-classique à l'opérateur de Schrödinger, de Dirac et à d'autres problèmes plus généraux de perturbation singulière.

Comme première application, nous montrons que la méthode B.K.W. fonctionne encore pour l'opérateur de Dirac avec champ magnétique, en limite semi-classique. Dans le cas d'un seul puits non dégénéré, un champ

magnétique, non nul au puits, lève alors la dégénérescence du niveau fondamental. Quand il y a en plus une deuxième symétrie, par exemple le cas du double puits, nous montrons que le niveau fondamental se décompose en 4 valeurs propres couplées deux par deux, l'écart entre les deux couples étant de l'ordre de h et plus précisément de l'ordre h^2 pour les petits champs magnétiques. Quand le champ magnétique respecte cette deuxième symétrie et qu'il n'est pas nul sur le puits, alors chaque couple représente deux valeurs propres simples dont l'écart, le «splitting», est exponentiellement petit; nous en donnons le développement asymptotique comme dans le cas de l'opérateur de Schrödinger.

Quand il n'y a pas de champ magnétique, chaque couple représente une valeur propre double et l'écart entre les deux couples est non nul mais exponentiellement petit, nous en donnons aussi le développement asymptotique de ce «splitting», ce qui n'était pas fait dans le travail de X. P. Wang [WAN].

Notre outil principal est la théorie de Helffer-Sjöstrand. C'est pour ça que le début du paragraphe II est consacré aux estimations d'Agmon nécessaires pour faire fonctionner la théorie. Le reste du paragraphe II est consacré au «splitting» en limite semi-classique.

Comme deuxième application, au paragraphe III, nous traitons la limite relativiste de l'opérateur de Dirac avec champ magnétique et un potentiel électrique de type Coulombien. Notre modèle de base est celui de l'électron $h\alpha D + \beta + hV\mathbf{1}_4$, avec $V(x) = -\tau/|x|$; h peut être considéré comme très petit, τ est un paramètre de l'ordre de $1/137.036$. Un autre modèle est celui de l'hydrogène ionisé H_2^+ , où $h=1$, $V_R(x) = -\tau/|x - \text{Re}| - \tau/|x + \text{Re}|$, R est un paramètre >0 très grand. L'homogénéité permet de se ramener au cadre général que nous traitons à savoir,

$$h \ll 1 \quad \text{et} \quad V(x) = c_0(x) + \sum_{j=1}^N \frac{c_j(x)}{|x - M_j|};$$

les $c_j(x)$ étant réguliers et bornés et $0 < h \ll 1$.

La théorie de Helffer-Sjöstrand marche encore comme dans [MOH] pour l'opérateur de Schrödinger. Les méthodes d'approximation du paragraphe I fonctionnent aussi. Malheureusement on n'a pas une méthode B.K.W. Par contre des estimations d'Agmon précisées permettent encore une estimation du «splitting» dans le cas du double puits et pour des petits champs magnétiques, ceci pour le niveau fondamental. On retrouve des propriétés semblables au cas de la limite semi-classique. Le résultat que nous obtenons pour H_2^+ améliore celui que l'on obtient dans [HA-KL].

Pour un problème de clarté, nous supposons que $W(x) \geq 0$ et $V(x) \leq 0$, ceci en vu de l'étude de l'effet tunnel. Dans ce cas, les valeurs propres < 0 proviennent de W et celles > 0 de V , mais en fait on peut établir des

théorèmes équivalents sans hypothèses globales sur le signe de W et de V , pourvu que l'on sache distinguer les influences de V et W sur la valeur propre que l'on étudie.

Nous adopterons les conventions suivantes (0.1) et (0.2).

Le paramètre h sera supposé > 0 et très petit,

$$(0.1) \quad h \in]0, h_0[, \text{ où } h_0 > 0 \text{ est supposé être très petit,}$$

et

$$(0.2) \quad \{ C \text{ désignera toute constante } > 0 \text{ indépendante de } h \}.$$

Nous remercions vivement B. Helffer et A. Martinez pour l'intérêt porté à ce travail.

1. DÉVELOPPEMENT ASYMPTOTIQUE DES VALEURS PROPRES

Dans ce chapitre nous allons étudier une perturbation singulière particulière et donner des conditions garantissant l'existence d'une valeur propre simple de l'opérateur perturbé.

Soit \mathcal{H} un espace de Hilbert séparable et soit H_0 un opérateur auto-adjoint sur \mathcal{H} de domaine $\mathcal{D}(H_0)$. Soit $E_0 \in \text{sp}_d(H_0)$ une valeur propre de H_0 , (si A est un opérateur $\text{sp}(A)$ désignera son spectre, $\text{sp}_{\text{es}}(A)$ son spectre essentiel et $\text{sp}_d(A)$ son spectre discret, l'ensemble de ses valeurs propres de multiplicité finie et qui sont isolées du reste du spectre). Soit \mathcal{H}_0 le sous-espace propre associé à E_0 . Soit H^h un opérateur auto-adjoint sur \mathcal{H} et dépendant d'un paramètre > 0 , h , vérifiant (0.1).

On suppose qu'il existe deux suites d'opérateurs symétriques $(H_j)_j$ et $(R_j)_j$ vérifiant les propriétés ci-dessous.

Il existe deux sous-espaces \mathcal{H}_∞ et \mathcal{H}_∞^1 tels que, pour tout $j > 0$, H_j et R_j , avec comme domaine \mathcal{H}_∞^1 , soient symétriques et que

$$(1.1) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}_0 = \text{Ker}(H_0 - E_0) \subset \mathcal{H}_\infty \subset \mathcal{H}_\infty^1 \subset \mathcal{D}(H_0) \cap \mathcal{D}(H^h) \\ \text{et} \\ (H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(\mathcal{H}_\infty) \subset \mathcal{H}_\infty; \end{array} \right.$$

(si F est un sous-espace fermé d'un espace de Hilbert E , Π_F désigne l'opérateur projection orthogonale sur F et $\bar{\Pi}_F$ celui sur le sous-espace orthogonal à F que nous noterons $E \ominus F$).

Pour tout entier $m \geq 0$, il existe C_m tel que, si $\|\cdot\|$ désigne la norme sur \mathcal{H} , on ait

$$(1.2) \left\{ \begin{array}{l} \left\| H^h u - \sum_{j=0}^m h^j H_j u \right\| \leq h^{m+1} C_m \|R_{m+1} u\|, \quad \forall u \in \mathcal{H}_\infty, \\ \text{et} \\ (H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} H_m(\mathcal{H}_\infty) \subset \mathcal{H}_\infty; \end{array} \right.$$

On se placera dans l'une des trois situations suivantes.

$$(1.3)_i \quad \dim \mathcal{H}_0 = 1$$

$$(1.3)_{ii} \left\{ \begin{array}{l} \dim \mathcal{H}_0 > 1 \text{ et } \exists j_1 \geq 1 \text{ tel que } H_j = 0, \text{ si } 0 < j < j_1, \\ K_1 := \Pi_{\mathcal{H}_0} H_{j_1} / \mathcal{H}_0 \text{ admet une valeur propre simple } E_{j_1}. \end{array} \right.$$

$$(1.3)_{iii} \left\{ \begin{array}{l} \dim \mathcal{H}_0 > 1 \text{ et } \exists j_1 \text{ et } j_2, 1 \leq j_1 < j_2 < 2j_1 \text{ tels que } H_j = 0, 0 < j < j_2, \\ j \neq j_1, K_1 \text{ admet une valeur propre multiple } E_{j_1} \text{ de sous-espace} \\ \text{propre } \mathcal{H}_{j_1} \text{ tel que } K_2 := \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} H_{j_2} / \mathcal{H}_{j_1} \text{ admette une valeur} \\ \text{propre simple } E_{j_2}. \end{array} \right.$$

On suppose en plus qu'il existe $\varepsilon_0 > 0$ tel que

$$(1.4) \quad \text{sp}(H^h) \cap I_{\varepsilon_0} = \text{sp}_d(H^h) \cap I_{\varepsilon_0}, \quad \text{avec } I_{\varepsilon_0} :=]-\varepsilon_0 + E_0, E_0 + \varepsilon_0[$$

et que, pour tout $C > 0$ fixé, pour toute valeur propre $\lambda(h)$ de H^h dans I_{hC} , pour tout vecteur propre associé u^h on ait $u^h \in \mathcal{H}_\infty^1$, et, si u^h est normalisé par $\|u^h\| = 1$, pour tout entier $m \geq 0$, il existe $C_m > 0$, ne dépendant que de m , tel que

$$(1.5) \quad \left\| H^h u^h - \sum_{j=0}^m h^j H_j u^h \right\| \leq h^{m+1} C_m.$$

THÉORÈME 1.1. — *Sous les hypothèses précédentes (1.1)-(1.5), H^h admet une valeur propre simple E^h et un vecteur propre associé u^h ayant un développement asymptotique en puissance de h :*

$$E^h \approx \sum_{j \geq 0} h^j E_j \quad \text{et} \quad u^h \approx \sum_{j \geq 0} h^j u_j$$

avec

$$u_j \in \mathcal{H}_\infty \quad \text{pour tout } j \geq 0.$$

Le développement asymptotique a le sens suivant. Il existe $m_0 \geq 0$ tel que pour tout entier $m \geq 0$, il existe C_m , ne dépendant que de m , tel que l'on ait

$$(1.6)_i \quad \left| E^h - \sum_{j=0}^m h^j E_j \right| \leq h^{m+1} C_m,$$

et

$$(1.6)_{ii} \quad \left\| u^h - \sum_{j=0}^m h^j u_j \right\| \leq h^{m+1-m_0} C_m.$$

Si de plus on est dans la situation (1.3)_{ii} ou (1.3)_{iii} alors

$$E_j = 0 \quad \text{pour } 0 < j < j_1,$$

si c'est précisément la situation (1.3)_{iii}, on a en plus

$$E_j = 0 \quad \text{pour } j_1 < j < j_2.$$

Des situations plus compliquées que (1.3)_i-(1.3)_{iii} où le théorème est encore vérifié peuvent se présenter. Le cas le plus général est celui où on a une suite exacte

$$0 \hookrightarrow \mathcal{H}_{j_k} \hookrightarrow \mathcal{H}_{j_{k-1}} \hookrightarrow \dots \hookrightarrow \mathcal{H}_{j_1} \hookrightarrow \mathcal{H}_0 \hookrightarrow 0,$$

avec

$$\mathcal{H}_{j_{l+1}} = \text{Ker} \{ \Pi_{\mathcal{H}_{j_l}} (\mathbf{H}_{j_l} - E_{j_l}) / \mathcal{H}_{j_l} \},$$

$\dim \mathcal{H}_{j_k} = 1$ et $\mathbf{H}_p = 0$ si $0 < p < j_k$ et $p \notin \{j_1, \dots, j_k\}$.

Dans ce cas général $j_1 < j_2 < \dots < j_k$ et il faut toujours imposer que $j_k < 2j_1$ plus d'autres conditions entre les j_p pour que la construction que nous allons faire dans le cas $k \leq 2$ puisse se faire.

Démonstration du théorème (1.1). — Soit $u_0 \in \mathcal{H}_0$ tel que $\|u_0\| = 1$, dans la situation (1.3)_{ii} on prend u_0 un vecteur propre associé à E_{j_1} et dans la situation (1.3)_{iii} un vecteur propre associé à E_{j_2} .

Construction de E_j et des u_j . — On cherchera u^h tel que $\langle u^h | u_0 \rangle = 1$ et donc on cherchera les u_j orthogonaux à u_0 pour $j > 0$. ($\langle \cdot | \cdot \rangle$ désigne le produit scalaire sur \mathcal{H}).

Cas où on a (1.3)_i. — C'est le cas le plus simple, E_0 et u_0 étant connus, on construit les E_j et les u_j par récurrence. On obtient les formules

$$(1.7)_j \quad E_j = \langle \mathbf{H}_j u_0 | u_0 \rangle + \sum_{k=1}^{j-1} \langle (\mathbf{H}_k - E_k) u_{j-k} | u_0 \rangle, \quad \text{pour } j > 0,$$

et

$$(1.8) \quad u_j = (\mathbf{H}_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} \left(\sum_{k=1}^j (\mathbf{E}_k - \mathbf{H}_k) u_{j-k} \right) \\ = (\mathbf{H}_0 - E_0)^{-1} \left(\sum_{k=1}^j (\mathbf{E}_k - \mathbf{H}_k) u_{j-k} \right).$$

On voit aisément que $u_j \in \mathcal{H}_\infty$, $\forall j \geq 0$.

Cas où on a (1.3)_{ii}. — Notons \mathcal{H}_{j_1} le sous-espace propre associé à E_{j_1} ; \mathcal{H}_{j_1} est engendré par u_0 . Si pour tout k , $0 < k < j_1$, on prend $E_k = 0$ et $u_k \in \mathcal{H}_0$, alors on a

$$(1.9)_j \quad \sum_{k=0}^j (\mathbf{H}_k - E_k) u_{j-k} = 0,$$

ceci pour tout $j < j_1$. L'égalité $(1.9)_{j_1}$ s'écrit $(H_0 - E_0) u_{j_1} = (E_{j_1} - H_{j_1}) u_0$, par conséquent

$$\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j_1}) = -(H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(H_{j_1} u_0),$$

ce qui détermine u_{j_1} modulo $\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}$ dans \mathcal{H}_∞ .

On fait l'hypothèse de récurrence suivante. Il existe un entier $j \geq j_1$ tel que les E_k , $0 \leq k \leq j$, soient connus ainsi que les u_k , pour $0 \leq k \leq j - j_1$, et que, pour $j - j_1 + 1 \leq k \leq j$, les u_k soient seulement connus modulo $\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}$, tous les u_k étant dans \mathcal{H}_∞ .

L'équation $(1.9)_{j+1}$ donne $(1.7)_{j+1}$ qui s'écrit

$$(1.10)_{j+1} \quad E_{j+1} = \langle H_{j+1} u_0 | u_0 \rangle + \sum_{k=1}^{j-j_1} \langle (H_{j+1-k} - E_{j+1-k}) u_k | u_0 \rangle + \langle (H_{j_1} - E_{j_1}) u_{j+1-j_1} | u_0 \rangle.$$

Tous les termes du second membre de l'égalité $(1.10)_{j+1}$ sont entièrement déterminés sauf le dernier, car u_{j+1-j_1} est seulement connu modulo $\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}$. Mais $\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(H_{j_1} - E_{j_1}) \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_1}} = 0$ et $u_0 \in \mathcal{H}_{j_1}$, et donc on a en fait $\langle (H_{j_1} - E_{j_1}) v | u_0 \rangle = 0 \quad \forall v \in \mathcal{H}_0$, par conséquent E_{j+1} est bien déterminé, dans $(1.10)_{j+1}$.

L'égalité $(1.9)_{j+1}$ sera vérifiée si, compte-tenu du fait que $(1.7)_{j+1}$ est satisfait, on a

$$(1.11)_{j+1} \quad \left\{ \begin{aligned} & \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}} \left(\sum_{k=0}^{j+1} (H_k - E_k) u_{j+1-k} \right) = 0 \\ & \Leftrightarrow \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}} (H_{j_1} - E_{j_1}) u_{j+1-j_1} \\ & \qquad \qquad \qquad = \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}} \left(\sum_{k=j_1+1}^{j+1} (E_k - H_k) u_{j+1-k} \right). \end{aligned} \right.$$

Comme le second membre de la dernière égalité ci-dessus est bien déterminé et que u_{j+1-j_1} est seulement connu modulo $\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}$, on en déduit que u_{j+1-j_1} est entièrement déterminé par $(1.11)_{j+1}$ du fait qu'on le cherche dans l'orthogonal de \mathcal{H}_{j_1} . On revient à $(1.9)_{j+1}$ qui impose le choix de u_{j+1} modulo $\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}$ car on le cherche dans l'orthogonal de \mathcal{H}_{j_1} :

$$\begin{aligned} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} u_{j+1} &= (H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} \sum_{k=j_1}^{j+1} (E_k - H_k) u_{j+1-k} \\ &= (H_0 - E_0)^{-1} \sum_{k=j_1}^{j+1} (E_k - H_k) u_{j+1-k}. \end{aligned}$$

On vérifie aisément que u_{j+1-j_1} et u_{j+1} sont dans \mathcal{H}_∞ .

Cas où on a (1.3)_{iii}. — On note \mathcal{H}_{j_2} le sous-espace propre de K_2 associé à la valeur propre E_{j_2} qui est engendré par u_0 . On prend

$$(1.12) \quad \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_j) = 0 \quad \text{pour } 0 \leq j < j_1.$$

Les égalités (1.9)_j sont alors vérifiées pour $j < j_1$. Celle (1.9)_{j_1} s'écrit

$$(H_0 - E_0)u_{j_1} = (E_{j_1} - H_{j_1})u_0,$$

comme $u_0 \in \mathcal{H}_{j_2} \subset \mathcal{H}_{j_1}$, elle détermine u_{j_1} modulo \mathcal{H}_0 par

$$(1.13) \quad \begin{aligned} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j_1}) &= -(H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(H_{j_1} - E_{j_1})u_0 \\ &= -(H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(H_{j_1}u_0). \end{aligned}$$

Écrivons (1.9)_j pour $j_1 < j < j_2$,

$$(1.14) \quad \begin{aligned} 0 &= \sum_{k=0}^j (H_k - E_k)u_{j-k} \\ &= (H_0 - E_0)u_j + (H_{j_1} - E_{j_1})u_{j-j_1}, \quad \text{pour } j_1 < j < j_2. \end{aligned}$$

Comme $j < j_2$ et $j_2 < 2j_1$, on a $j - j_1 < j_1$ et d'après (1.12) on a donc $u_{j-j_1} \in \mathcal{H}_0$.

L'égalité (1.14) impose que, pour $j_1 < j < j_2$, on ait

$$(1.15) \quad \begin{cases} u_{j-j_1} \in \mathcal{H}_{j_1} \quad \text{et que} \\ \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_j) = -(H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(H_{j_1}u_{j-j_1}). \end{cases}$$

L'égalité (1.9)_{j_2} s'écrit

$$(1.16) \quad 0 = (H_0 - E_0)u_{j_2} + (H_{j_1} - E_{j_1})u_{j_2-j_1} + (H_{j_2} - E_{j_2})u_0.$$

Comme $j_1 < j_2 < 2j_1$, (1.12) et (1.15) nous montrent que la seule condition imposée à $u_{j_2-j_1}$ est d'être dans \mathcal{H}_0 , mais $u_0 \in \mathcal{H}_{j_2}$, ce qui implique que

$$\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_1}}(H_{j_2} - E_{j_2})u_0 = 0,$$

et donc l'égalité (1.16) est vérifiée si on la projette sur \mathcal{H}_{j_1} . Comme on cherche $u_{j_2-j_1}$ dans $\mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_{j_2}$, on en déduit en projetant (1.16) sur \mathcal{H}_0 que

$$(1.17) \quad \begin{cases} u_{j_2-j_1} \in \mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_2} \quad \text{et que} \\ \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}}(u_{j_2-j_1}) = -(K_1 - E_{j_1})^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}}(H_{j_2}u_0); \end{cases}$$

$u_{j_2-j_1}$ est donc connu modulo $\mathcal{H}_{j_1} \ominus \mathcal{H}_{j_2}$.

On a alors d'après (1.16) et (1.17)

$$(1.18) \quad \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j_2}) = -(H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(H_{j_1}u_{j_2-j_1} + H_{j_2}u_0).$$

Comme $u_{j_1-j_1}$ n'est connu que modulo $\mathcal{H}_{j_1} \ominus \mathcal{H}_{j_2}$, la projection de u_{j_2} sur l'orthogonal de \mathcal{H}_0 n'est pas encore déterminée.

On fait une démonstration par récurrence. On suppose qu'il existe un entier $j \geq j_2$ tel que

$$E_{j-k}, u_{j-j_2-k}, \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j+j_1-j_2-k}) \quad \text{et} \quad \Pi_{\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{j_1}}(u_{j-j_1-k})$$

soient parfaitement connus pour tout $k \geq 0$ et que l'on a

$$\Pi_{\mathcal{H}_0} \left(\sum_{k=1}^{j-i} (H_k - E_k) u_{j-i-k} \right) = 0, \quad \forall i, \quad 0 \leq i \leq j.$$

L'égalité (1.9)_{j+1} s'écrit alors

$$(1.19)_{j+1} \quad E_{j+1} u_0 = (H_0 - E_0) u_{j+1} + (H_{j_1} - E_{j_1}) \Pi_{\mathcal{H}_0}(u_{j+1-j_1}) \\ + (H_{j_2} - E_{j_2}) \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}}(u_{j+1-j_2}) + f_{j+1}$$

où f_{j+1} est un vecteur de \mathcal{H} parfaitement connu :

$$f_{j+1} = H_{j+1} u_0 + \sum_{k=j_2+1}^j (H_k - E_k) u_{j+1-k} + (H_{j_1} - E_{j_1}) \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j+1-j_1}) \\ + (H_{j_2} - E_{j_2}) \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_1}}(u_{j+1-j_2}).$$

On projette (1.19)_{j+1} sur \mathcal{H}_{j_2} et on obtient que

$$(1.20)_{j+1} \quad E_{j+1} = \langle f_{j+1} | u_0 \rangle.$$

On projette (1.19)_{j+1} sur $\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}$ et on obtient que

$$(1.21)_{j+1} \quad \Pi_{\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}}(u_{j+1-j_2}) = -[K_2 - E_{j_2}]^{-1} \Pi_{\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}}(f_{j+1}).$$

Comme on cherche les u_k , pour $k > 0$, dans l'orthogonal de \mathcal{H}_{j_2} , la projection de u_{j+1-j_2} sur \mathcal{H}_{j_1} est donc entièrement déterminée. On projette alors (1.19)_{j+1} sur $\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{j_1}$ et on obtient

$$(1.22)_{j+1} \quad \Pi_{\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{j_1}}(u_{j+1-j_1}) = -[K_1 - E_{j_1}]^{-1} \Pi_{\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{j_1}}(g_{j+1}) \\ \text{avec} \quad g_{j+1} := f_{j+1} + (H_{j_2} - E_{j_2}) \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}}(u_{j+1-j_2});$$

u_{j+1-j_1} est donc seulement connu modulo \mathcal{H}_{j_1} et on a

$$\Pi_{\mathcal{H}_0} \left(\sum_{k=1}^{j+1} (H_k - E_k) u_{j+1-k} \right) = 0.$$

On revient à (1.19)_{j+1+j_1-j_2} qui s'écrit maintenant

$$(1.23) \quad (H_0 - E_0) u_{j+1+j_1-j_2} = q_{j+1+j_1-j_2}$$

où $q_{j+1+j_1-j_2}$ est un vecteur parfaitement connu et qui est dans l'orthogonal de \mathcal{H}_0 , on a donc $\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j+1+j_1-j_2}) = (H_0 - E_0)^{-1} (q_{j+1+j_1-j_2})$.

Par conséquent, la construction des suites (E_j) et (u_j) est possible et on vérifie aisément grâce à l'hypothèse (1.2) que les u_j sont dans \mathcal{H}_∞ . Pour

tout m on a bien

$$(1.24) \quad \left\| \left(\mathbf{H}^h - \sum_{j=0}^m h^j \mathbf{E}_j \right) \left(\sum_{k=0}^m h^k u_k \right) \right\| = \mathcal{O}(h^{m+1}).$$

Unicité de la valeur propre. — Comme $\|u_0\| = 1$, pour tout $m \geq 0$, on a

$$(1.25) \quad \left\| \sum_{j=0}^m h^j u_j \right\| - 1 = \mathcal{O}(h), \quad h \rightarrow 0.$$

On déduit alors facilement de (1.24) et (1.25) que, pour tout entier $m > 0$, il existe $C_m > 0$ tel que

$$(1.26) \quad \left. \begin{array}{l} \text{avec} \\ \mathbf{I}_m(h) := \left\{ \sum_{j=0}^m h^j \mathbf{E}_j \right\} +] - h^{m+1} C_m, h^{m+1} C_m[. \end{array} \right\} \quad \text{sp}(\mathbf{H}^h) \cap \mathbf{I}_m(h) \neq \emptyset,$$

L'hypothèse (1.4) nous assure alors que

$$\text{sp}(\mathbf{H}^h) \cap \mathbf{I}_m(h) = \text{sp}_d(\mathbf{H}^h) \cap \mathbf{I}_m(h) \neq \emptyset.$$

On va faire la démonstration dans le cas où c'est l'hypothèse (1.3)_{iii} qui est vérifiée, les autres cas étant beaucoup plus faciles.

Nous avons donc à montrer que, si $m \geq j_2$, alors le projecteur spectral de \mathbf{H}^h sur $\mathbf{I}_m(h)$ est de rang un. On fait une démonstration par l'absurde.

Soit $\lambda(h) \in \text{sp}_d(\mathbf{H}^h) \cap \mathbf{I}_m(h)$ et soit u^h le vecteur propre associé et normalisé :

$$\mathbf{H}^h u^h = \lambda(h) u^h \quad \text{et} \quad \|u^h\| = 1.$$

L'hypothèse (1.2) et celle (1.5) avec $m = j_1 - 1$ montrent que

$$\|\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u^h)\| = \mathcal{O}(h^{j_1}).$$

Si maintenant $v \in \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{j_1}$ est un vecteur propre normé de \mathbf{K}_1 ,

$$\Pi_{\mathcal{H}_0}(\mathbf{H}_{j_1} - \mathbf{E}_{j_1})v = \lambda v, \quad \text{avec } \lambda \in \mathbb{R}^*, \quad \text{et } \|v\| = 1,$$

on obtient, en utilisant (1.5) avec $m = j_2 - 1$ et l'estimation précédente que

$$\begin{aligned} 0 &= \langle [(\mathbf{H}_0 - \mathbf{E}_0) + h^{j_1}(\mathbf{H}_{j_1} - \mathbf{E}_{j_1})] u^h | v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2}) \\ &= \langle u^h | h^{j_1}(\mathbf{H}_j - \mathbf{E}_{j_1})v \rangle + \mathcal{O}(h^2) \\ &= h^{j_1} \langle u^h | \Pi_{\mathcal{H}_0}(\mathbf{H}_{j_1} - \mathbf{E}_{j_1})v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2}) = \lambda h^{j_1} \langle u^h | v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2}). \end{aligned}$$

On a donc $\|\Pi_{\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{j_1}} u^h\| = \mathcal{O}(h^{j_2 - j_1})$.

On suppose maintenant que $v \in \mathcal{H}_{j_1} \oplus \mathcal{H}_{j_2}$ est un vecteur propre normé de \mathbf{K}_2 , on a donc $\Pi_{\mathcal{H}_{j_1}}(\mathbf{H}_{j_2} - \mathbf{E}_{j_2})v = \lambda v$, avec $\lambda \in \mathbb{R}^*$, et $\|v\| = 1$.

On utilise de nouveau (1.5), avec $m=j_2$, et les deux estimations déjà obtenues, on a

$$\begin{aligned} 0 &= \langle u^h | [h^{j_1} (H_{j_1} - E_{j_1}) + h^{j_2} (H_{j_2} - E_{j_2})] v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1}) \\ &= \langle u^h | \Pi_{\mathcal{H}_0} [h^{j_1} (H_{j_1} - E_{j_1}) + h^{j_2} (H_{j_2} - E_{j_2})] v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1}) \\ &= h^{j_2} \langle u^h | \Pi_{\mathcal{H}_0} (H_{j_2} - E_{j_2}) v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1}) \\ &= h^{j_2} \langle u^h | \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} (H_{j_2} - E_{j_2}) v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1}) = \lambda h^{j_2} \langle u^h | v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1}). \end{aligned}$$

On en déduit donc que $\|\Pi_{\mathcal{H}_{j_1} \oplus \mathcal{H}_{j_2}} u^h\| = \mathcal{O}(h)$, ce qui donne que $\|\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_2}} u^h\| = \mathcal{O}(h)$. Si \mathcal{H}_h est le sous espace associé aux valeurs propres $\lambda(h) \in I_m(h)$ de H^h , on a donc $\dim \mathcal{H}_{\lambda(h)} \leq \dim \mathcal{H}_{j_2}$, comme on sait que $\dim \mathcal{H}_{j_2} \leq \dim \mathcal{H}_h$, on a donc $\dim \mathcal{H}_h = \dim \mathcal{H}_{j_2}$. Le reste de la démonstration est immédiat. ■

Un cas fréquent est celui où dans (1.3)_{iii} on a $j_1 = 1$ et $j_2 = 2$. Ce cas ne rentre pas dans le cadre du théorème (1.1) mais on peut encore faire la construction en changeant \mathcal{H}_{j_2} et E_{j_2} .

On fait les hypothèses suivantes.

Il existe un entier $j_1 > 0$ tel que H_{j_1} soit non identiquement nul et tel que

$$(1.27)_i \quad \begin{cases} E_0 \text{ est valeur propre multiple de } H_0 \\ H_j = 0, \text{ pour } 0 < j < j_2, j \neq j_1, \text{ avec } j_2 := 2j_1. \end{cases}$$

Il existe une valeur propre multiple E_{j_1} de K_1 , de sous-espace propre \mathcal{H}_{j_1} tel que l'opérateur K'_2 ,

$$(1.27)_{ii} \quad K'_2 := \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} [-(H_{j_1} - E_{j_1})(H_0 - E_0)^{-1}(H_{j_1} - E_{j_1}) + H_{j_2}] / \mathcal{H}_{j_1},$$

admette une valeur propre simple E_{j_2} de sous-espace propre \mathcal{H}_{j_2} :

$$(1.27)_{iii} \quad \mathcal{H}_{j_2} := \text{Ker}(K'_2 - E_{j_2}) \quad \text{et} \quad \dim(\mathcal{H}_{j_2}) = 1.$$

On choisit $u_0 \in \mathcal{H}_{j_2}$ avec $\|u_0\| = 1$.

Remarquons que H_{j_2} peut être identiquement nul.

THÉORÈME 1.2. — *Les conclusions du théorème 1.1 sont encore satisfaites si on remplace l'hypothèse (1.3)_{iii} par (1.27)_i et (1.27)_{iii}.*

Preuve. — Il suffit de vérifier que la construction des E_k et des u_k est possible de façon à ce que les égalités (1.9)_j soient vérifiées.

Les égalités (1.9)_j pour $0 < j < j_1$ imposent seulement que $u_k \in \mathcal{H}_0$ pour tout k , $0 < k < j_1$. Comme on cherche les u_j orthogonaux à \mathcal{H}_{j_2} , on doit avoir

$$u_k \in \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{j_2} \quad \text{pour tout } k, 0 < k < j_1.$$

L'égalité (1.9)_{j₁} donne

$$(1.28) \quad \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j_1}) = -(H_0 - E_0)^{-1}(H_{j_1} - E_{j_1})u_0;$$

aucune condition n'est imposée sur la projection de u_{j_1} sur $\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{j_1}$.

Les égalités (1.9)_j, pour $j_1 < j < j_2$, nécessitent que l'on ait (1.15). Il n'y a aucune condition à imposer sur la projection des u_{j-j_1} , $j_1 < j < j_2$, sur $\mathcal{H}_{j_1} \ominus \mathcal{H}_{j_2}$; remarquer que u_{j-j_1} est dans \mathcal{H}_0 . Si on connaît la projection de u_{j-j_1} sur $\mathcal{H}_{j_1} \ominus \mathcal{H}_{j_2}$ alors u_{j-j_1} sera entièrement déterminé et permettra de connaître $\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_j)$, ceci quand $j_1 < j < j_2$.

L'égalité (1.9)_{j_2} s'écrit

$$(1.29) \quad (H_0 - E_0)u_{j_2} + (H_{j_1} - E_{j_1})u_{j_1} + (H_{j_2} - E_{j_2})u_0 = 0.$$

D'après (1.28), on a

$$\begin{aligned} \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}}[(H_0 - E_0)u_{j_2} + (H_{j_1} - E_{j_1})u_{j_1} + (H_{j_2} - E_{j_2})u_0] \\ = \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}}[(H_{j_1} - E_{j_1})u_{j_1} + (H_{j_2} - E_{j_2})u_0] = \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}}(K'_2 - E_{j_2})u_0 = 0; \end{aligned}$$

par conséquent, en projetant (1.29) sur $\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}$, on trouve que

$$\begin{aligned} \Pi_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}}(u_{j_1}) = \\ -[K_1 - E_{j_1}]^{-1} \Pi_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}}[(H_{j_2} - E_{j_2})u_0 + (H_{j_1} - E_{j_1})\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j_1})], \end{aligned}$$

compte-tenu de (1.28), cette égalité détermine complètement u_{j_1} modulo $\mathcal{H}_{j_1} \ominus \mathcal{H}_{j_2}$. La projection sur \mathcal{H}_0 de l'égalité (1.29) est donc vérifiée, par conséquent, on peut trouver u_{j_2} tel que l'on ait (1.29) et u_{j_2} est donné modulo \mathcal{H}_0 par

$$\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j_2}) = -(H_0 - E_0)^{-1} (H_{j_1} - E_{j_1}) \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_1} \ominus \mathcal{H}_{j_2}}(u_{j_1}) + g_{j_2},$$

avec g_{j_2} qui est un vecteur de l'orthogonal de \mathcal{H}_0 bien déterminé, seule la projection de u_{j_1} sur $\mathcal{H}_{j_1} \ominus \mathcal{H}_{j_2}$ n'est pas encore connue.

On fait l'hypothèse de récurrence suivante. On suppose qu'il existe un entier $j \geq j_2$ tel que les E_{j-k} , u_{j-j_2-k} , $\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_1}}(u_{j-j_1-k})$ et $\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j-k})$, pour tout $k \geq 0$, soient entièrement connus et que les (1.9)_{j-k} soient vérifiés et soient équivalents à

$$\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0}(u_{j-k}) = -(H_0 - E_0)^{-1} (H_{j_1} - E_{j_1}) \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_1}}(u_{j-j_1-k}) + g_{j-k},$$

où g_{j-k} est un vecteur de l'orthogonal de \mathcal{H}_0 parfaitement connu, ceci pour tout $k \geq 0$. L'égalité (1.9)_{j+1} s'écrit alors

$$(1.30) \quad (H_0 - E_0)u_{j+1} + (H_{j_1} - E_{j_1})u_{j+1-j_1} \\ + (H_{j_2} - E_{j_2})u_{j+1-j_2} + f_{j+1} = E_{j+1}u_0,$$

où f_{j+1} est un vecteur bien déterminé de \mathcal{H} .

On utilise l'hypothèse de récurrence et le fait que $j_2 = 2j_1$ pour écrire (1.30) sous la forme de

$$(1.30') \quad E_{j+1} u_0 = (H_0 - E_0) u_{j+1} + (H_{j_1} - E_{j_1}) \Pi_{\mathcal{H}_0} (u_{j+1-j_1}) \\ + [- (H_{j_1} - E_{j_1}) (H_0 - E_0)^{-1} (H_{j_1} - E_{j_1}) \\ + (H_{j_2} - E_{j_2})] \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} (u_{j+1-j_2}) + r_{j+1},$$

où r_{j+1} est un vecteur bien déterminé de \mathcal{H} .

On projette (1.30') sur \mathcal{H}_{j_2} et on a $E_{j+1} = \langle r_{j+1} | u_0 \rangle$.

On projette (1.30') sur $\mathcal{H}_{j_1} \oplus \mathcal{H}_{j_2}$ et on obtient que

$$\Pi_{\mathcal{H}_{j_1} \oplus \mathcal{H}_{j_2}} (u_{j+1-j_2}) = - (K'_2 - E_{j_2})^{-1} \Pi_{\mathcal{H}_{j_1} \oplus \mathcal{H}_{j_2}} (r_{j+1}),$$

ce qui complète la détermination de u_{j+1-j_2} et donc celle de $\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (u_{j+1-j_1})$. On projette (1.30) sur $\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{j_1}$ et on en déduit que

$$\Pi_{\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{j_1}} (u_{j+1-j_1}) = - (K_1 - E_{j_1})^{-1} \Pi_{\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{j_1}} [(H_{j_1} - E_{j_1}) \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (u_{j+1-j_1}) \\ + (H_{j_2} - E_{j_2}) (u_{j+1-j_2}) + f_{j+1}].$$

Quand on projette (1.30) sur l'orthogonal de \mathcal{H}_0 , on obtient enfin que

$$\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (u_{j+1}) = - (H_0 - E_0)^{-1} (H_{j_1} - E_{j_1}) \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} (u_{j+1-j_1}) + g_{j+1},$$

où g_{j+1} est un vecteur dans l'orthogonal de \mathcal{H}_0 bien déterminé.

La construction des E_k et des u_k est donc possible.

Pour l'unicité, si $\lambda(h)$ est une valeur propre de H^h dans $I_m(h)$ avec $m \geq j_2$ et u^h un vecteur propre normé associé, on obtient de la même façon que dans la démonstration du théorème 1.1 que

$$\| \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} u^h \| = \mathcal{O}(h^{j_1}) \quad \text{et que} \quad \| \Pi_{\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{j_1}} u^h \| = \mathcal{O}(h^{j_2-j_1}) = \mathcal{O}(h^{j_1}).$$

Plus précisément on a

$$(1.31) \quad \| \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} u^h + h^{j_1} (H_0 - E_0)^{-1} (H_{j_1} - E_{j_1}) u^h \| = \mathcal{O}(h^{j_2}).$$

Si $v \in \mathcal{H}_{j_1} \oplus \mathcal{H}_{j_2}$ est un vecteur propre normé de K'_2 , on a $(K'_2 - E_{j_2}) v = \lambda v$ avec $\lambda \in \mathbb{R}^*$ et $\|v\| = 1$. On utilise (1.5) avec $m = j_2$ et on a

$$0 = \langle u^h | [h^{j_1} (H_{j_1} - E_{j_1}) + h^{j_2} (H_{j_2} - E_{j_2})] v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1}) \\ = h^{j_1} \langle \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} u^h | (H_{j_1} - E_{j_1}) v \rangle + h^{j_2} \langle u^h | \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} (H_{j_2} - E_{j_2}) v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1}).$$

On utilise (1.31) et le fait que $j_2 = 2j_1$ pour voir que

$$0 = h^{j_2} \langle u^h | (K'_2 - E_{j_2}) v \rangle \\ - h^{j_2} \langle \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_1}} u^h | (H_{j_1} - E_{j_1}) (H_0 - E_0)^{-1} (H_{j_1} - E_{j_1}) v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1}) \\ = h^{j_2} \lambda \langle u^h | v \rangle + \mathcal{O}(h^{j_2+1});$$

ce qui permet d'avoir que $\| \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_{j_1}} u^h \| = \mathcal{O}(h)$ et de conclure. ■

Quand on est en présence de symétries on ne peut pas espérer avoir les hypothèses des théorèmes (1.1) et (1.2) car les valeurs propres de H^h peuvent être toutes multiples, l'exemple le plus courant est celui de l'opérateur de Dirac sans champ magnétique. Nous allons toutefois pouvoir conclure dans les cas ci-dessous.

On suppose qu'il existe un opérateur antilinéaire J qui est défini sur tout \mathcal{H} et vérifiant les propriétés

$$(1.32) \left\{ \begin{array}{l} J(\lambda u + \mu v) = \bar{\lambda} J(u) + \bar{\mu} J(v) \quad \forall (u, v) \in \mathcal{H}^2 \\ \text{et } \forall (\lambda, \mu) \in \mathbb{C}^2 \\ J^2(u) = -u \quad \text{et} \quad \langle J(u) | u \rangle = 0 \quad \forall u \in \mathcal{H} \\ J(\mathcal{D}(H_0)) = \mathcal{D}(H_0), \quad J(\mathcal{D}(H^h)) = \mathcal{D}(H^h) \\ \text{et } J(\mathcal{H}_\infty) = \mathcal{H}_\infty \\ JH_0 = H_0 J, \quad JH^h = H^h J \\ \text{et} \\ JH_k(u) = H_k J(u) \quad \forall u \in \mathcal{H}_\infty, \quad \forall k \in \mathbb{N}. \end{array} \right.$$

Alors dans ce cas, les valeurs propres de H_0 , de H^h , de K_1 défini dans (1.3)_{ii} et de K_2 défini dans (1.3)_{iii} sont toutes de multiplicité paire. On a alors le théorème suivant.

THÉORÈME 1.3. — *Si (1.32) est vérifié et si les hypothèses du théorème 1.1 sont satisfaites avec les modifications suivantes des cas (1.3)_i-(1.3)_{iii},*

— *dans (1.3)_i on suppose que E_0 est une valeur propre double : $\dim(\mathcal{H}_0) = 2$,*

— *dans (1.3)_{ii} on suppose que $\dim(\mathcal{H}_0) > 2$ et que E_{j_1} est une valeur propre double de K_1 : $\dim(\mathcal{H}_{j_1}) = 2$,*

— *dans (1.3)_{iii} on suppose que $\dim(\mathcal{H}_0) > 2$ et $\dim(\mathcal{H}_{j_1}) > 2$ et que E_{j_2} est une valeur propre double de K_2 : $\dim(\mathcal{H}_{j_2}) = 2$.*

Alors H^h admet une valeur propre double E^h de sous-espace propre ayant une base de la forme $\{u^h, J(u^h)\}$, de plus E^h et u^h admettent un développement asymptotique comme dans le théorème 1.1.

Preuve. — *Cas où on est dans la situation (1.3)_i modifiée, $\dim \mathcal{H}_0 = 2$.*

Remarquons que \mathcal{H}_0 est de dimension 2 et par conséquent, si T est un opérateur symétrique défini sur \mathcal{H}_∞ et qui commute avec J , il existe alors un réel λ tel que $\Pi_{\mathcal{H}_0} T \Pi_{\mathcal{H}_0} = \lambda \Pi_{\mathcal{H}_0}$.

Remarquons aussi que s'il existe un entier $j > 0$ tel que l'on puisse trouver des vecteurs $u_k, k = 0, 1, \dots, j$, de $\mathcal{H}_\infty, u_0 \in \mathcal{H}_0$ avec $\|u_0\| = 1$, et des scalaires $E_k, k = 1, \dots, j$, tels que les égalités (1.9)_k soient vérifiées pour $k = 0, 1, \dots, j$, alors on a forcément les E_k qui sont des réels. La raison est que H^h est auto-adjoint et que

$$\left\| \left(H^h - \sum_{k=0}^j h^k E_k \right) \left(\sum_{k=0}^j h^k u_k \right) \right\| = \mathcal{O}(h^{j+1}).$$

L'équation (1.9)₁ s'écrit $(H_0 - E_0)u_1 + (S_1 - E_1)u_0 = 0$, avec $S_1 := H_1$ qui opère symétriquement sur \mathcal{H}_∞ et commute avec J. On choisit E_1 tel que $\Pi_{\mathcal{H}_0} S_1 \Pi_{\mathcal{H}_0} = E_1 \Pi_{\mathcal{H}_0}$ et on a alors

$$u_1 = -(H_0 - E_0)^{-1} (S_1 - E_1) u_0 = -\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (S_1 - E_1) u_0.$$

L'équation (1.9)₂ s'écrit alors $(H_0 - E_0)u_2 + (S_2 - E_2)u_0 = 0$, avec

$$S_2 := H_2 - (S_1 - E_1) \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (S_1 - E_1).$$

S_2 opère symétriquement sur \mathcal{H}_∞ et commute avec J, on choisit alors E_2 tel que $\Pi_{\mathcal{H}_0} S_2 \Pi_{\mathcal{H}_0} = E_2 \Pi_{\mathcal{H}_0}$.

Faisons l'hypothèse de récurrence suivante. On suppose qu'il existe un entier $j \geq 1$, des opérateurs S_k , pour $k = 1, \dots, j$, opérant sur \mathcal{H}_∞ , qui commutent avec J et satisfont $\Pi_{\mathcal{H}_0} S_k \Pi_{\mathcal{H}_0} = E_k \Pi_{\mathcal{H}_0}$, avec E_k réel. On suppose en plus que les équations (1.9)_k, pour $k = 0, 1, \dots, j$, sont vérifiées avec $u_k = -(H_0 - E_0)^{-1} (S_k - E_k) u_0$, $\forall k = 1, \dots, j$ et $\forall u_0 \in \mathcal{H}_0$. L'équation (1.9)_{j+1} s'écrit alors $(H_0 - E_0)u_{j+1} + (S_{j+1} - E_{j+1})u_0 = 0$, avec

$$S_{j+1} := H_{j+1} - \sum_{k=1}^j (H_k - E_k) (H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (S_{j+1-k} - E_{j+1-k}).$$

S_{j+1} opère sur \mathcal{H}_∞ et commute avec J. Pour montrer qu'il existe un réel E_{j+1} tel que $\Pi_{\mathcal{H}_0} S_{j+1} \Pi_{\mathcal{H}_0} = E_{j+1} \Pi_{\mathcal{H}_0}$, on raisonne de la façon suivante. Si E_{j+1} est une valeur propre de l'opérateur commutant avec J, $\Pi_{\mathcal{H}_0} S_{j+1} / \mathcal{H}_0$, de vecteur propre u_0 , \bar{E}_{j+1} est la deuxième valeur propre de vecteur propre associé J(u_0). On a (1.9)_{j+1} qui est vérifié si on prend $u_{j+1} = -(H_0 - E_0)^{-1} (S_{j+1} - E_{j+1}) u_0$.

On a donc forcément E_{j+1} qui est réel, on a bien

$$\Pi_{\mathcal{H}_0} S_{j+1} \Pi_{\mathcal{H}_0} = E_{j+1} \Pi_{\mathcal{H}_0}.$$

La construction des E_k et des u_k est donc possible, les u_k étant orthogonaux à \mathcal{H}_0 , pour $k > 0$. L'algorithme de construction du théorème 1.1 est donc encore valable.

En fait, on pourrait vérifier que les S_k opèrent symétriquement sur \mathcal{H}_∞ .

Cas où on est dans la situation (1.3)_{ii} modifiée, $\dim \mathcal{H}_{j_1} = 2$. — On montre de la même façon que l'algorithme du théorème 1.1 est encore valable si on cherche les u_k orthogonaux à \mathcal{H}_{j_1} . Pour le voir on définit comme ci-dessus des opérateurs S_k sur \mathcal{H}_∞ qui commutent avec J. Les E_k et les u_k satisfont les propriétés suivantes.

Premièrement les E_k sont définis par $\Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} S_k \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} = E_k \Pi_{\mathcal{H}_{j_1}}$.

Deuxièmement les u_k sont déterminés en deux étapes par

$$\Pi_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}} u_{k-j_1} = -(K_1 - E_{j_1}) \Pi_{\mathcal{H}_0 \ominus \mathcal{H}_{j_1}} (S_k - E_k) u_0$$

et par $\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} u_k = -(H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (S_k - E_k) u_0$.

On a $S_{j_1} = H_{j_1}$, $S_k = 0$ pour $k = 0, \dots, j_1 - 1$, et

$$S_j u_0 = H_j u_0 + (H_{j_1} - E_{j_1}) \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} u_{j-j_1} + \sum_{k=1}^{j-1-j_1} (H_{j-k} - E_{j-k}) u_k.$$

Il suffit de choisir u_0 dans \mathcal{H}_{j_1} tel que $\|u_0\| = 1$ et l'algorithme de construction du théorème 1.1 fonctionne encore sans changement: $E_j = \langle S_j u_0 | u_0 \rangle$.

Cas où on est dans la situation (1.3)_{iii} modifiée, $\dim \mathcal{H}_{j_2} = 2$. — C'est le même raisonnement que précédemment si on cherche les u_k orthogonaux à \mathcal{H}_{j_2} pour $k > 0$. Ici les S_k , les E_k et les u_k vérifient les propriétés suivantes.

Comme précédemment, on a $\Pi_{\mathcal{H}_{j_2}} S_k \Pi_{\mathcal{H}_{j_2}} = E_k \Pi_{\mathcal{H}_{j_2}}$, et les u_k sont donnés en trois étapes par

- premièrement, $\Pi_{\mathcal{H}_{j_1}} u_{k-j_2} = -(K_2 - E_{j_2})^{-1} \Pi_{\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}} (S_k - E_k) u_0$,
- deuxièmement, $\Pi_{\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{j_1}} u_{k-j_1} = (K_1 - E_{j_1})^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{j_1}} (S_k - E_k) u_0$,
- et troisièmement $\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} u_{k+j_1-j_2} = -(H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (S_k - E_k) u_0$.

On a $S_k = H_k$ pour $0 < k \leq j_2$ et $S_k u_0 = f_k, f_k$ étant celui de (1.19)_k. L'algorithme du théorème 1.1 reste inchangé dès que l'on a choisi $u_0 \in \mathcal{H}_{j_2}$, $\|u_0\| = 1$: $E_j = \langle S_j u_0 | u_0 \rangle$.

THÉORÈME 1.4. — Si (1.32) est vérifié et si les hypothèses du théorème 1.2 sont satisfaites avec les modifications ci-dessous.

On suppose que E_0 est une valeur propre d'ordre > 4 de H_0 , que E_{j_1} est une valeur propre d'ordre > 2 de K_1 et que E_{j_2} est une valeur propre double de K_2 :

$$\dim(\mathcal{H}_0) > 4, \dim(\mathcal{H}_{j_1}) > 2, \dim(\mathcal{H}_{j_2}) = 2 \quad \text{et} \quad j_2 = 2j_1.$$

Alors H^h admet une valeur propre double E^h de sous-espace propre ayant une base de la forme $\{u^h, J(u^h)\}$, de plus E^h et u^h admettent un développement asymptotique comme dans le théorème 1.1.

La démonstration est identique, K'_2 commute avec J . On définit les S_k , les u_k et les E_k , pour $k > 0$ de la façon suivante:

$S_k u_0 = r_k, r_k$ est défini dans (1.30'), E_k vérifie $\Pi_{\mathcal{H}_{j_2}} S_k \Pi_{\mathcal{H}_{j_2}} = E_k \Pi_{\mathcal{H}_{j_2}}$, et on a:

$$\begin{aligned} \Pi_{\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}} (u_{k-j_2}) &= -(K'_2 - E_{j_2})^{-1} \Pi_{\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}} (S_k - E_k) u_0, \\ \Pi_{\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{j_1}} (u_{k-j_1}) &= -(K_1 - E_{j_1})^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{j_1}} (S_k - E_k) u_0 \end{aligned}$$

et

$$\bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (u_k) = -(H_0 - E_0)^{-1} \bar{\Pi}_{\mathcal{H}_0} (S_k - E_k) u_0.$$

L'algorithme de construction marche encore en prenant $u_0 \in \mathcal{H}_{j_2}$, $\|u_0\| = 1$, et en cherchant les u_k orthogonaux à \mathcal{H}_{j_2} : $E_k = \langle S_k u_0 | u_0 \rangle$ ■

Exemples d'application à l'opérateur de Schrödinger en limite semi-classique. Exemple 1.5. — On considère sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ l'opérateur de

Schrödinger $P^h = (ih \nabla + \vec{a}(x))^2 + V(x)$, avec $V(x) = c_0(x) + c_1(x)/|x|$ et $\vec{a}(x) = (a_1(x), a_2(x), a_3(x))$, les $c_i(x)$ et les $a_i(x)$ sont des fonctions C^∞ et réelles. On suppose que, pour tout multi-indice γ , $|\gamma| > 1$, il existe C_γ tel que $|\partial_x^\gamma \vec{a}(x)| \leq C_\gamma (|\vec{B}(x)| + 1)$, $\text{Inf} \{ V(x); |x| > R \} \rightarrow 0$, quand $R \rightarrow \infty$, et $c_1(0) < 0$, ($\vec{B}(x) = \nabla \times \vec{a}(x)$ désigne le champ magnétique).

P^h est alors essentiellement auto-adjoint à partir de $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ et si $(E_j^h)_j$ est la suite croissante des valeurs propres, on a $h^2 E_j^h = e_j + \mathcal{O}(h)$, où $(e_j)_j$ est la suite croissante des valeurs propres de $H_0 = -\Delta + c_1(0)/|x|$. De plus, pour tout ouvert Ω , voisinage de $\{0\}$, la suite $(E_{\Omega, j}^h)_j$ des valeurs propres du problème de Dirichlet sur Ω relatif à P^h vérifient :

$$E_j^h - E_{\Omega, j}^h = \mathcal{O}(e^{-\delta/h^2}),$$

ceci pour tout j fixé, ($\delta > 0$ dépendant seulement de j et de Ω , voir [MOH] pour les preuves).

Pour avoir le développement asymptotique d'une valeur propre donnée E_j^h , on peut donc supposer que les c_i et les a_i sont à support compact; dans ce cas on peut appliquer la théorie précédente. On peut toujours supposer que $\vec{a}(0) = \vec{0}$. On considère $H^h = (i\nabla + h\vec{a}(h^2 x))^2 + h^2 V(h^2 x)$, la suite des valeurs propres de H^h est $(h^2 E_j^h)_j$. Quand on fait le développement de Taylor des $c_i(h^2 x)$ et des $a_i(h^2 x)$, on obtient que $H^h \approx \sum_{k \geq 0} h^k H_k$, H_{2k} est la multiplication par une fonction $F_k(x) = p_k(x) + q_k(x)/|x|$, p_k et q_k sont des polynômes et $q_k(0) = 0$, $H_{2k+1} v = i \nabla \cdot \vec{s}_k(x) v + i s_k(x) \nabla v$, $s_k(x)$ étant un polynôme en x .

Soit $E_0 = e_m$ une valeur propre donnée de H_0 , $e_m = -\lambda^2$ et $\lambda = \tau/(2j)$, $\tau = -c_1(0)$ et j est un entier > 0 . La valeur propre E_0 est dégénérée à l'ordre j^2 et les fonctions propres sont dans

$$\mathcal{E}_{j-1} = (\mathcal{P}_{j-1} + |x| \mathcal{P}_{j-1}) e^{-\lambda|x|},$$

où \mathcal{P}_k est l'espace des polynômes en x de degré $\leq k$. On peut donc prendre \mathcal{H}_∞ comme étant l'union de tous les \mathcal{E}_k . La vérification de (1.5) est aisée compte tenu de la décroissance exponentielle des fonctions propres, (voir par exemple [MOH] pour les inégalités d'Agmon permettant de le vérifier). On remarque en plus que $H_0 - E_0$ opère de \mathcal{E}_k dans \mathcal{F}_k ,

$$\mathcal{F}_k := \left(\mathcal{P}_k + \frac{1}{|x|} \mathcal{P}_k \right) e^{-\lambda|x|}.$$

Par conséquent, comme dans la plupart des cas où on aura à déterminer $(H_0 - E_0)^{-1} \Pi_{\mathcal{H}_0} f$, f étant dans un \mathcal{F}_k , quitte à prendre un autre k plus grand, il suffira d'inverser $A_k : \mathcal{E}_k \rightarrow \mathcal{F}_k$, A_k étant la restriction de $H_0 - E_0$. L'inversion de A_k peut se faire aisément à la main.

On obtient aisément les résultats suivants pour le deuxième niveau d'énergie : $j = 2$.

1° Si $\nabla c_1(0) = \vec{0}$ et si $\vec{B}(0) \neq \vec{0}$, alors E_2^h et E_5^h sont deux valeurs propres simples et on a

$$-Ch \leq E_2^h + (\tau/(4h))^2 - c_0(0) \leq -hC^{-1}$$

et

$$hC^{-1} \leq E_5^h + (\tau/(4h))^2 - c_0(0) \leq hC.$$

Les deux autres valeurs propres du même niveau vérifient

$$E_i^h = -(\tau/(4h))^2 + c_0(0) + \mathcal{O}(h^2), \quad \text{pour } i=3 \text{ et } 4.$$

2° Si en plus $\vec{B}(0)\nabla c_0(0) \neq 0$, alors E_3^h et E_4^h sont simples et $h^2 C^{-1} \leq E_4^h - E_3^h \leq Ch^2$.

3° Si on a $\partial_x^\gamma c_1(0) = 0$, pour $1 \leq |\gamma| \leq 3$, $\partial_x^\gamma c_0(0) = \vec{0}$, pour $1 \leq |\gamma| \leq 2$, et si on a toujours $\vec{B}(0) \neq \vec{0}$, alors E_3^h et E_4^h sont des valeurs propres simples et on a

$$h^3 C^{-1} \leq E_4^h - E_3^h \leq h^3 C.$$

C'est une application directe du théorème 1.1, cas (ii) pour le 1° et (iii) pour le 2°, puis du théorème 1.2 pour le 3°, (faire un changement de variable pour se ramener à $\vec{a}(x) = \mu(x_2, -x_1, 0) + \mathcal{O}(|x|^2)$).

Exemple 1.6. — On considère le cas de l'hydrogène ionisé. Soit sur $L^2(\mathbb{R}^3)$, $P^h = (i\nabla + h^3 \vec{a}(x))^2 - \frac{1}{|x - h^{-2} \vec{n}|} - \frac{1}{|x + h^{-2} \vec{n}|}$, où \vec{n} est un vecteur donné de \mathbb{R}^3 ; on suppose que $\vec{a}(x) = 1/2 \mu \vec{n} \times x$, où $\mu > 0$ est donné. Soit $(E_m^h)_m$, la suite croissante des valeurs propres de P^h . Il résulte de [MOH] que, pour tout entier $k > 0$, il existe m_k tel que

$$E_{2k}^h - E_{2k-1}^h = \mathcal{O}(h^{-m_k} e^{-\lambda S/h^2}),$$

avec $S = 2|\vec{n}|$ et $\lambda > 0$ est tel que $-\lambda^2$ soit la valeur propre de $-\Delta - 1/|x|$ vérifiant $E_{2k}^h = -\lambda^2 + \mathcal{O}(h)$.

On a alors grâce au théorème 1.2, qu'il existe des constantes > 0 C_m , $m = 1, \dots, 3$, tels que $E_3^h < E_5^h - h^3 C_1 < E_7^h - h^5 C_2 < E_9^h - h^3 C_3$.

Exemple 1.7. — On se place dans le cadre de l'exemple 1.5 et on suppose que $c_1(x) \equiv 0$ et que $c_0(0)$ est un minimum non dégénéré pour $c_0(x)$. C'est le cas traité dans [HE-SJ]_{1,3}. En faisant la dilatation $h^{-1/2}x \rightarrow x$, on se ramène, comme dans l'exemple 1.5 à une situation où on a un opérateur H^h ayant un développement asymptotique en puissance de $h^{1/2}$. On se place dans le cas du petit champ magnétique, c'est-à-dire que l'on met $h^{1/2} \vec{a}(x)$ à la place de $\vec{a}(x)$. Pour avoir des valeurs propres multiples, on va considérer le cas le plus compliqué, à savoir que $c_0(x) = c_0(0) + |x|^2 + \mathcal{O}(|x|^3)$, ($H_0 = -\Delta + |x|^2$). On peut prendre \mathcal{H}_∞ , l'union des $\mathcal{P}_k e^{-1/2|x|^2}$. (L'inversion de $H_0 - E_0$ se réduit alors à inverser un opérateur agissant sur un espace de polynômes).

Quand $\vec{B}(0) \neq \vec{0}$, on vérifie aussi facilement que le niveau 2 pour H_0 , qui est dégénéré à l'ordre 3, éclate en trois valeurs propres simples pour P^h .

2. INÉGALITÉS D'ÉNERGIE ET STABILITÉ DE L'OPÉRATEUR DE DIRAC

2.1. *Généralités sur l'opérateur de Dirac*

On considère dans \mathbb{R}^3 deux potentiels électriques $V(x)$ et $W(x)$ et un potentiel magnétique $\vec{a}(x)$ vérifiant les hypothèses suivantes :

$$(2.1) \left\{ \begin{array}{l} V(x) = c_0(x) + \sum_{j=1}^N \frac{c_j(x)}{|x - M_j|}, \\ W(x) \text{ et les } c_j(x) \in C^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}), \quad j=0, 1, \dots, N, \\ \Gamma := \{M_1, \dots, M_N\} \text{ est un ensemble de } N \text{ points de } \mathbb{R}^3, \end{array} \right.$$

$$(2.2) \quad \vec{a}(x) = (a_1(x), \dots, a_3(x)) \in C^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}^3).$$

On suppose pour simplifier que

$$(2.3) \quad V(x) \rightarrow 0 \quad \text{et} \quad W(x) \rightarrow 0, \quad \text{quand } |x| \rightarrow \infty.$$

On considère l'opérateur de Dirac

$$(2.4) \quad P_{hV+W}^h(\vec{a}) = \alpha \cdot D^h(\vec{a}) + \beta + (hV(x) + W(x)) 1_4,$$

(1_k désigne la matrice identité $k \times k$), $D^h(\vec{a}) := (hD_1 - a_1(x), hD_2 - a_2(x), hD_3 - a_3(x)) = -i\nabla - \vec{a}(x)$, $i = \sqrt{-1}$, ∇ désigne le gradient, $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ et β sont les matrices 4×4 suivantes.

$$\alpha_j = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{bmatrix}, \quad 1 \leq j \leq 3, \quad \text{et} \quad \beta = \begin{bmatrix} 1_2 & 0 \\ 0 & -1_2 \end{bmatrix},$$

les matrices σ_j sont celles de Pauli,

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

D'après [HE-NO-WA], $P_0^h(\vec{a})$ est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{H} := (L^2(\mathbb{R}^3))^4$ à partir de $C_0^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$, l'espace des fonctions C^∞ à valeur dans \mathbb{C}^4 et à support compact dans \mathbb{R}^3 . On désignera encore $P_0^h(\vec{a})$ l'opérateur auto-adjoint associé; son spectre ne rencontre pas l'intervalle $]-1, 1[$:

$$(2.5) \quad \text{sp}(P_0^h(\vec{a})) \cap]-1, 1[= \emptyset.$$

Comme $P_0^h(\vec{a})$ est essentiellement auto-adjoint, on a

$$(2.6) \quad \{u \in \mathcal{H}; (hD_j - a_j(x))u \in \mathcal{H}, j=1, 2, 3\} \subset \mathcal{D}(P_0^h(\vec{a})) = \{u \in \mathcal{H}; \alpha \cdot (hD - \vec{a})u \in \mathcal{H}\}.$$

Rappelons l'inégalité

$$(2.7) \quad \left\| \frac{u}{|x|} \right\| \leq 2h^{-1} \|P_0^h(\vec{0})u\|, \quad \forall u \in (H^1(\mathbb{R}^3))^4;$$

si Ω est un ouvert de \mathbb{R}^3 , $H^m(\Omega)$ désigne l'espace de Sobolev d'ordre m sur Ω et $H_0^1(\Omega)$ l'adhérence de $C_0^\infty(\Omega)$.

Faisons alors l'hypothèse suivante. Il existe $\delta_0 > 0$ tel que

$$(2.8) \quad 0 < |c_j(M_j)| \leq \delta_0, \quad \forall j = 1, \dots, N,$$

et

$$(2.9) \quad \delta_0 < \frac{1}{2}.$$

Cette hypothèse, (2.1)-(2.3) et (2.7) montrent qu'il existe $C_0 > 0$, tels que

$$(2.10) \quad \begin{cases} \|(hV + W)u\| \leq 2\delta_0 \|P_0^h(\vec{a})u\| + C_0 \|u\|, \\ \forall u \in \mathcal{D}(P_0^h(\vec{a})) \quad \text{et} \quad \forall h \in]0, h_0[. \end{cases}$$

Comme dans le cas sans champ magnétique (cf. [KAT]), un théorème de perturbation de Kato permet de voir que (2.9) et (2.10) entraînent que $P_{hV+W}^h(\vec{a})$ est essentiellement auto-adjoint sur \mathcal{H} , à partir de $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ et qu'on a

$$(2.11) \quad \begin{cases} \mathcal{D}(P_{hV+W}^h(\vec{a})) = \mathcal{D}(P_0^h(\vec{a})) \\ \text{et} \\ \text{sp}_{\text{es}}(P_{hV+W}^h(\vec{a})) = \text{sp}_{\text{es}}(P_0^h(\vec{a})); \end{cases}$$

(la dernière égalité résulte de la première et de (2.3)).

La borne 1/2 pour δ_0 n'est pas optimale, on peut prendre $\delta_0 \leq 1$ mais dans la suite nous aurons besoin de (2.9) ce qui suffit dans les applications physiques courantes.

Soit Ω un ouvert borné de \mathbb{R}^3 , connexe et de frontière $\partial\Omega$ régulière, Ω étant situé d'un seul côté de $\partial\Omega$. Il est bien connu que l'opérateur $P_0^h(\vec{a})$ sur $(L^2(\Omega))^4$ admet une unique extension auto-adjointe contenant $(C_0^\infty(\Omega))^2 \times (C^\infty(\bar{\Omega}))^2$; nous noterons $P_0^{h,\Omega}(\vec{a})$ cette réalisation auto-adjointe. On a, (voir par exemple le chapitre 20 de [HOR]), que

$$\mathcal{D}(P_0^{h,\Omega}(\vec{a})) = (H_0^1(\Omega))^2 \times (H^1(\Omega))^2.$$

Si on a en plus

$$(2.12) \quad \Gamma \cap \partial\Omega = \emptyset, \quad (\Gamma \text{ est défini dans (2.1)}),$$

alors on peut définir de la même façon que précédemment un opérateur auto-adjoint sur $(L^2(\Omega))^4$ à partir $P_{hV+W}^h(\vec{a})$ que nous notons $P_{hV+W}^{h,\Omega}(\vec{a})$ de même domaine que $P_0^{h,\Omega}(\vec{a})$:

$$(2.13) \quad \mathcal{D}(P_{hV+W}^{h,\Omega}(\vec{a})) = (H_0^1(\Omega))^2 \times (H^1(\Omega))^2.$$

Soit J l'opérateur anti-linéaire

$$(2.14) \quad J: (L^2(\Omega))^2 \times (L^2(\Omega))^2 \rightarrow (L^2(\Omega))^2 \times (L^2(\Omega))^2$$

$$u = (u_+, u_-) \rightarrow J(u) = (\sigma_2 \bar{u}_+, \sigma_2 \bar{u}_-).$$

On a $J^2 = -I$ et $P_{hV+W}^h(\vec{0})$ commute avec J , comme $\langle J(u) | u \rangle = 0, \forall u \in (L^2(\Omega))^4$, on en déduit la remarque suivante.

Remarque 2.0. — Si $E(h)$ est une valeur propre dans le spectre discret de $P_{hV+W}^h(\vec{0})$ ou simplement de $P_{hV+W}^h(\vec{0})$ et si $\mathcal{H}_{E(h)}$ est le sous-espace propre associé alors

$$J(\mathcal{H}_{E(h)}) = \mathcal{H}_{E(h)} \quad \text{et donc} \quad \dim(\mathcal{H}_{E(h)}) = 2k, \quad \text{avec} \quad k \in \mathbb{N}.$$

On peut trouver une base de $\mathcal{H}_{E(h)}$, (u_1, \dots, u_{2k}) , telle que $J(u_j) = u_{j+k}$, pour $j = 1, \dots, k$.

Dans le cas où il y a un champ magnétique, on a seulement

$$P_{hV+W}^h(\vec{a})J = JP_{hV+W}^h(-\vec{a}).$$

En général, l'adjonction d'un champ magnétique fait éclater la multiplicité des valeurs propres.

2.2. *Inégalités d'énergie.* — Ce qui nous intéresse dans ce chapitre c'est l'étude de la décroissance des fonctions propres de l'opérateur de Dirac. Cette étude a déjà été faite dans [BE-GE] et partiellement par [WAN] mais ici nous avons besoin d'estimations précises et tenant compte du petit paramètre h , du potentiel magnétique \vec{a} et de la singularité de V . Les techniques que nous utiliserons sont celles bien connues de Helffer et Sjöstrand [HE-SJ]_{1, \dots, 3}, c'est pour ça que nous serons succints, les démonstrations étant voisines de [WAN] et [MOH]. Soit $\varphi(x)$ une fonction réelle et lipschitzienne sur \mathbb{R}^3 . Si $\varphi(x)$ est borné, on a l'égalité

$$(2.15) \quad \|D^h(\vec{a})(e^{\varphi/h}u)\|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} e^{2\varphi/h} [1 - |\nabla\varphi|^2 - (hV+W)^2] |u|^2 dx$$

$$= \text{Re}(\langle e^{2\varphi/h} P_{hV+W}^h(\vec{a})u | P_{-(hV+W)}^h(\vec{a})u \rangle$$

$$- 2 \text{Im}(\langle e^{2\varphi/h} P_{hV+W}^h(\vec{a})u | (\nabla\varphi \cdot \alpha)u \rangle), \quad \forall u \in D(P_0^h(\vec{a})).$$

Soit $E(h) \in]-1, 1[$ une valeur propre de $P_{hV+W}^h(\vec{a})$. On définit la distance d'Agmon modifiée $d_{E(h)}(x, y)$ associée à la métrique riemannienne et dégénérée

$$[1 - (hV(x) + W(x) - E(h))^2]_+ dx^2.$$

On appelle alors puits une composante connexe de

$$(2.16) \quad \Gamma_{E(h)} = \{x \in \mathbb{R}^3; 1 - (hV(x) + W(x) - E(h))^2 \leq 0\}$$

et on définit la fonction lipschitzienne

$$(2.17) \quad d_{E(h)}(x) := \inf \{ d_{E(h)}(x, y); y \in \Gamma_{E(h)} \}$$

qui vérifie $|\nabla d_{E(h)}(x)|^2 \leq [1 - (hV(x) + W(x) - E(h))^2]_+$.

PROPOSITION 2.1. — *Sous les hypothèses (2.1)-(2.3) et (2.9), s'il existe $\varepsilon_0, 0 < \varepsilon_0 < 1$, et une valeur propre de $P_{hV+W}^h(\vec{a})$, $E(h)$, vérifiant*

$$(2.18) \quad E(h) \in]-1 + \varepsilon_0, 1 - \varepsilon_0[$$

et si u^h est une fonction propre associée, alors pour tout $\varepsilon, 0 < \varepsilon < 1$, il existe $C_\varepsilon > 0$ tel que l'on ait

$$(2.19) \quad \|D^h(\vec{a}) e^{(1-\varepsilon)d_{E(h)}(x)/h} u^h\|^2 + \varepsilon \int [1 - (hV(x) + W(x) - E(h))^2]_+ \times e^{2(1-\varepsilon)d_{E(h)}(x)/h} |u^h(x)|^2 dx \leq C_\varepsilon \|u^h\|^2.$$

Esquisse de la démonstration. — Pour établir (2.19), on utilise (2.15) avec une fonction $\varphi(x) = \varphi_R(x)$, $\varphi_R(x) = (1 - \varepsilon)d_{E(h)}(x)$ si $d_{E(h)}(x) < R$ et $\varphi_R(x) = R$ si $d_{E(h)}(x) \geq R$ et on fait tendre R vers l'infini. Ensuite on remarque que (2.18) assure que $\Gamma_{E(h)}$ est contenu dans un borné indépendant de h , de plus il existe $C > 0$ tel que pour tout $\tau, 0 < \tau < 1$, on a

$$[1 - (hV(x) + W(x) - E(h))^2]_- \leq (1 + \tau)h^2V^2(x) + \tau^{-1}C.$$

L'hypothèse (2.9) et l'estimation (2.10) montrent alors qu'il existe τ_0 et C_0 indépendants de h tels que l'on ait

$$\int [1 - (hV(x) + W(x) - E(h))^2]_- |u^h(x)|^2 dx \leq (1 - \tau_0) \|D^h(\vec{a}) e^{(1-\varepsilon)d_{E(h)}(x)/h} \chi_h u^h\|^2 + C_0 \|u^h\|^2,$$

où χ est une fonction de troncature à support dans $\Gamma_{E(h)}$ et égale à 1 sur $\{x; \exists j \text{ tel que } |x - M_j| < h\}$. De là on en déduit aisément (2.19) ■

Nous allons faire l'étude de certaines valeurs propres de $P_{hV+W}^h(\vec{a})$ dans le cas simple suivant

$$(2.20) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{et} \\ \text{avec} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} c_j(M_j) < 0, \quad \text{pour } j = 1, \dots, N, \\ 0 \leq W(x) \leq \delta_1, \quad \forall x \in \mathbb{R}^3, \\ 0 \leq \delta_1 < 1 + \sqrt{1 - c_j^2(M_j)}, \quad \forall j, j = 1, \dots, N. \end{array}$$

Pour tout $j = 1, \dots, N$, on se donne un ouvert Ω_j borné et à frontière régulière, Ω_j étant situé d'un seul côté de $\partial\Omega_j$ et vérifiant

$$(2.21) \quad \partial\Omega_j \cap \Gamma = \emptyset.$$

On suppose que M_j est l'unique singularité de V dans Ω_j :

$$(2.22) \quad \Omega_j \cap \Gamma = \{M_j\}.$$

Soit $\varepsilon_1, 0 < \varepsilon_1 < 1$. On omettra dans la suite l'indice j , Ω désignera Ω_j .

PROPOSITION 2.2. — *Sous l'hypothèse (2.21) et celles de la proposition 2.1, si $\lambda(h)$ est une valeur propre de $P_{hV+W}^{h,\Omega}(\vec{a})$ vérifiant*

$$(2.23) \quad \left\{ \begin{array}{l} \lambda(h) \in]-1 + \varepsilon_1, 1 - \varepsilon_1[\\ \text{et} \\ 1 - (W(x) - \lambda(h))^2 \geq \varepsilon_1^2, \quad \forall x \in \Omega, \end{array} \right.$$

et si u^h est une fonction propre associée à $\lambda(h)$ et normalisée par $\|u^h\| = 1$, alors il existe $C > 0$ tel que l'on ait

$$(2.24) \quad \|D^h(\vec{a}) e^{d_{\lambda(h)}(x)/h} u^h\|^2 + h \|e^{d_{\lambda(h)}(x)/h} u^h\|^2 \leq C \|u^h\|^2.$$

L'égalité (2.15) est encore valable sur Ω avec $u \in \mathcal{D}(P_{hV+W}^{h,\Omega}(\vec{a}))$. On prend $\varphi(x) = (1-h)d_{\lambda(h)}(x)$ et on remarque que l'hypothèse (2.23) implique qu'il existe $C > 0$ tel que

$$1 - (hV(x) + W(x) - \lambda(h))^2 \geq \varepsilon_1^2/2, \quad \forall x \in \Omega \quad \text{et} \quad |x - M_j| \geq hC.$$

On suit alors la démonstration de la proposition 2.1 pour conclure. ■

2.3. *Approximation des valeurs propres. Matrice d'interaction.* — Soit $V_j(x)$ le potentiel

$$(2.25) \quad V_j(x) := c_j(M_j) |x - M_j|^{-1}$$

Les valeurs propres de $P_{V_j}^1(\vec{0})$ sont positives, on les range en une suite croissante $(e_{j,k})_k$, soit de même la suite croissante, $(\lambda_{j,k}(h))_k$, des valeurs propres ≥ 0 de $P_{hV+W}^{h,\Omega}(\vec{a})$.

PROPOSITION 2.3. — *Sous l'hypothèse (2.20) et celles de la proposition 2.1, si δ_1 dans (2.20) vérifie $\delta_1 < 1$, alors, pour tout entier $k > 0$ fixé tel que $W(M_j) + e_{j,k} < 1$, il existe $C_k > 0$ ne dépendant que de k tel que l'on ait*

$$(2.26) \quad |\lambda_{j,k}(h) - W(M_j) - e_{j,k}| \leq h \ln(h^{-1}) C_k,$$

et pour tout $\tau > 0$ fixé, on a

$$(2.27) \quad \text{sp}(P_{hV+W}^{h,\Omega}(\vec{a})) \cap]-1 + \delta_1 + h^{1-\tau}, W(M_j)] = \emptyset.$$

Preuve. — On travaille dans une jauge où $\vec{a}(M_j) = \vec{0}$. Soit $k > 1$ un entier fixé et ε fixé tels que: $e_{j,k} + W(M_j) < 1$ et $0 < \varepsilon < 1 - \delta_1$. L'hypothèse (2.20) avec $\delta_1 < 1$ assure que (2.23) est vérifié pour toute valeur propre $\lambda(h) \in]-1 + \delta_1 + \varepsilon, e_{j,k} + W(M_j)]$. Si u^h est une fonction propre normée d'une telle valeur propre et si χ est une fonction de troncature à support dans Ω et qui vaut 1 dans un voisinage de M_j , alors on a

$$\|(P_{hV_j}^h(\vec{0}) + W(M_j) - \lambda(h)) \chi u^h\| \leq C(h + \| |x - M_j| \chi u^h \|).$$

On remarque alors que, si $\rho > 0$ est fixé et si $C > 0$ est choisi assez grand, on a

$$e^{-d_\lambda(h)(x)/h} \leq h^\rho C, \quad \forall x \in \Omega, |x - M_j| > h \ln(h^{-1}) C.$$

On utilise alors (2.24) pour voir que $\|\chi u^h\| - 1 = \mathcal{O}(h^m)$, $\forall m > 0$, et que

$$(2.28) \quad \|(\mathbf{P}_{h\nu_j}^h(\vec{0}) + \mathbf{W}(M_j) - \lambda(h)) \chi u^h\| \leq h \ln(h^{-1}) C \|\chi u^h\|.$$

Si maintenant u_p est une fonction propre normée de $\mathbf{P}_{\nu_j}^1(\vec{0})$ associé à une valeur propre $e_{j,p}$ avec $p < k$, on pose

$$u_p^h(x) = h^{-3/2} u_p(M_j + h^{-1}(x - M_j)),$$

alors u_p^h est une fonction propre normée de $\mathbf{P}_{h\nu_j}^h(\vec{0})$ associée à la valeur propre $e_{j,p}$, la décroissance exponentielle de u_p montre que

$$(2.29) \quad \|(\mathbf{P}_{h\nu+w}^h(\vec{a}) - \mathbf{W}(M_j) - e_{j,p}) \chi u_p^h\| \leq h C \|\chi u_p^h\| \quad \text{et} \quad \|\chi u_p^h\| - 1 = \mathcal{O}(h^m), \quad \forall m > 0.$$

Les propriétés (2.28) et (2.29) établissent aisément (2.26) et en plus on a

$$\text{sp}(\mathbf{P}_{h\nu+w}^h(\vec{a}) \cap]-1 + \delta_1 + \varepsilon, \mathbf{W}(M_j)] = \emptyset.$$

Pour compléter la démonstration de (2.27), on remarque que, si dans (2.23) on remplace ε_1 par $h^{1-\tau}$, $0 < \tau < 1$, alors on aurait

$$d_\lambda(h)(x) \geq 2h^{1-\tau} |x - M_j|, \quad \forall x \in \Omega \quad \text{et} \quad |x - M_j| \geq h^\tau C,$$

ce qui donnerait comme dans (2.24) l'estimation

$$\|e^{d_\lambda(h)(x)} u^h\| \leq h^{\tau-3/2} C \|u^h\|.$$

On en déduirait comme pour établir (2.28) que, si

$$\lambda(h) \in]-1 + \delta_1 + h^{1-\tau}, \mathbf{W}(M_j)]$$

et si u^h est une fonction propre normée associée, alors

$$\|(\mathbf{P}_{h\nu_j}^h(\vec{0}) + \mathbf{W}(M_j) - \lambda(h)) \chi u^h\| \leq h^\tau \ln(h^{-1}) \|\chi u^h\| \quad \text{et} \quad \|\chi u^h\| - 1 = \mathcal{O}(h^m), \quad \forall m > 0,$$

ce qui permet de conclure ■

Soit $\tau, \tau \in]0, 1[$, et soit $C > 1$ fixé, on considère l'intervalle $I(h) \subset]0, 1[$,

$$(2.30) \quad I(h) =]-hC + \tau, \tau + hC].$$

Pour tout $j = 1, \dots, N$, on considère les valeurs propres $\lambda_{j,k}(h)$ de $\mathbf{P}_{h\nu_j}^h(\vec{a})$ qui sont incluses dans $I(h)$, on notera γ le multi-indice (j, k) . On a alors, pour tout $E(h) \in I(h)$, le puits $\Gamma_{E(h)}$ défini dans (2.16) qui est formé d'un ensemble à N parties connexes, plus précisément, il existe $C > 0$

tel que l'on ait

$$(2.31) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{B}(M_j; h C^{-1}) \subset \Gamma_{E(h)} \subset \bigcup_{m=1}^N \mathbf{B}(M_m; h C); \quad \forall j=1, \dots, N, \\ \text{et} \\ -h C + d_{E(h)}(x) \leq d_\tau(x) \leq d_{E(h)}(x) + h C, \quad \forall x \in \mathbb{R}^3; \end{array} \right.$$

$(\mathbf{B}(y; R) := \{x \in \mathbb{R}^3; |x - y| < R\})$.

Pour tout $j=1, \dots, N$, on choisit Ω_j tel que

$$(2.32) \quad \{x \in \mathbb{R}^3; d_\tau(x, M_j) \leq S_0/2\} \subset \Omega_j;$$

où S_0 est défini par $S_0 := \inf\{d_\tau(M_p, M_m); p, m=1, \dots, N, p \neq m\}$.

On note u_γ^h une fonction propre normée et associée à $\lambda_\gamma(h)$. Pour chaque j , on choisit une fonction de troncature $\chi_j(x)$, C^∞ et à support dans Ω_j et telle que

$$(2.33) \quad \chi_j(x) = 1, \quad \text{si } d_\tau(x, M_j) < \frac{1}{2} S_0, \quad \text{et } 0 \leq \chi_j(x) \leq 1.$$

On considère les fonctions

$$(2.34) \quad \psi_\gamma(x) := \chi_{\gamma_1}(x) u_\gamma^h(x), \quad \gamma = (\gamma_1, \gamma_2) \quad \text{avec } \lambda_\gamma(h) \in I(h).$$

Soit E le sous-espace engendré par les ψ_γ et soit F l'image de la projection spectrale de $P_{h\nu+w}^h(\vec{a})$ sur $I(h)$. On suppose qu'il existe $m_1 > 1$ tel que

$$(2.35) \quad \left\{ \text{sp}(P_{h\nu+w}^h(\vec{a})) \cup \left(\bigcup_{j=1}^N \text{sp}(P_{h\nu+w}^{h, \Omega_j}(\vec{a})) \right) \right\} \cap \{I(h) + [-h^{m_1}, h^{m_1}] \setminus I(h)\} = \emptyset.$$

On déduit aisément de ce qui précède un théorème à la Helffer-Sjöstrand, (voir [HE-SJ] ou [HEL]).

THÉORÈME 2.4. — *Sous les hypothèses ci-dessus et celles de la proposition 2.3, il existe $\varepsilon > 0$ tel que l'on ait*

$$\vec{d}(E, F) = \vec{d}(F, E) = \mathcal{O}(e^{-(S_0 + \varepsilon)/(2h)}).$$

De plus il existe une bijection

$$s_h : \text{sp}(P_{h\nu+w}^h(\vec{a})) \cap I(h) \rightarrow I(h) \cap \left\{ \bigcup_{j=1}^N \text{sp}(P_{h\nu+w}^{h, \Omega_j}(\vec{a})) \right\}$$

telle que $s_h(\lambda) - \lambda = \mathcal{O}(e^{-(S_0 + \varepsilon)/(2h)})$.

La matrice de $P_{h\nu+w}^h(\vec{a})$ restreinte à F est donnée, dans une base convenablement choisie, par

$$(2.36) \quad K = G + L + R + \mathcal{O}(e^{-S_0 + \varepsilon/h}),$$

où G est la matrice diagonale, $G = \text{diag}(\lambda_\gamma(h))$, L et R sont donnés par

$$(2.37) \quad L_{\gamma, \zeta} = -\frac{1}{2}(\omega_{\gamma, \zeta} + \bar{\omega}_{\zeta, \gamma}),$$

avec

$$\omega_{\gamma, \zeta} := -ih \langle (\nabla \chi_{\gamma_1} \cdot \alpha u_\gamma^h | \chi_{\zeta_1} u_\zeta^h \rangle,$$

et

$$(2.38) \quad R_{\gamma, \zeta} = -\frac{1}{4}(\lambda_\gamma(h) - \lambda_\zeta(h))(\langle \psi_\gamma | \psi_\zeta \rangle - \langle \psi_\zeta | \psi_\gamma \rangle).$$

(On a noté $\vec{d}(E, F)$ la distance non symétrique: $\vec{d}(E, F) := \|\Pi_E - \Pi_F \Pi_E\|$).

Si on a en plus

$$(2.39) \quad \lambda_\gamma - \lambda_\zeta = \mathcal{O}(e^{-(S_0 + \varepsilon)/(2h)}), \quad \forall \gamma \text{ et } \zeta,$$

alors

$$(2.40) \quad \omega_{\gamma, \zeta} - \bar{\omega}_{\zeta, \gamma} = \mathcal{O}(e^{-(S_0 + \varepsilon)/(2h)}),$$

comme dans [HE-SJ]₁, on vérifie que l'on a alors

$$(2.41) \quad \omega_{\gamma, \zeta} = -ih \int_{\Sigma_{\gamma, \zeta}} \langle (\vec{n} \cdot \alpha) u_\gamma^h | u_\zeta^h \rangle ds + \mathcal{O}(e^{-(S_0 + \varepsilon)/h}),$$

où $\Sigma_{\gamma, \zeta}$ est une surface régulière incluse dans $\Omega_{\gamma_1} \cap \Omega_{\zeta_1}$.

Remarque 2.5. — Si $\vec{a}(x) \equiv 0$, alors, d'après la remarque 2.0, les sous-espaces E et F sont invariants par J et de dimension paire $2k$. On peut choisir une base telle que la matrice K dans (2.36) ait la forme bloc 2×2 suivante :

$$K = \begin{pmatrix} K_1 & K_2 \\ -K_2 & K_1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(e^{-(S_0 + \varepsilon)/h}),$$

où K_1 et K_2 sont 2 matrices $k \times k$ vérifiant la même décomposition que K dans (2.36) avec K_1 est hermitienne K_2 anti-hermitienne.

2.4. Méthode B.K.W. pour le premier niveau négatif et « splitting ». — On fait l'hypothèse supplémentaire suivante. La fonction $W(x)$ prend son maximum en un nombre fini de points,

$$(2.42) \quad W^{-1}\{\delta_1\} = \{Z_1, \dots, Z_{N_0}\}, \text{ où } N_0 \text{ est un entier } > 0 \text{ donné,}$$

(δ_1 est celui de (2.20)).

On suppose en plus que

$$(2.43) \quad \begin{cases} Z_j \notin \Gamma, & \forall j=1, \dots, N_0, \text{ et que} \\ W''(Z_j) < 0, & \forall j=1, \dots, N_0; \end{cases}$$

où $W''(Z)$ désigne la matrice hessienne de W au point Z :

$$W(Z+x) = W(Z) + x \cdot \nabla W(Z) + \frac{1}{2} x \cdot W''(Z) x + \mathcal{O}(|x|^3), \quad \text{quand } |x| \rightarrow 0.$$

Dans ce chapitre, on va se limiter aux petits champs magnétiques, le potentiel magnétique sera dorénavant $h\vec{a}(x)$. On s'intéressera aux valeurs propres de $P_{h\nabla+W}^h(h\vec{a})$ proches de $-1 + \delta_1$. Soit $\tau, 0 < \tau < \frac{1}{2}$, si $E(h)$ est une valeur propre de $P_{h\nabla+W}^h(h\vec{a})$,

$$(2.44) \quad E(h) \in I^0(h) :=]-h^{1-\tau} - 1 + \delta_1, -1 + \delta_1 + h^{1-\tau}[,$$

et si u^h est une fonction propre normée et associée à $E(h)$, la décroissance de u^h donnée par (2.19) montre que u^h est concentré dans le puit $\Gamma_{E(h)}$ qui est inclus dans un petit voisinage de $M_j, j=1, \dots, N$, et des $Z_p, p=1, \dots, N_0$. Plus précisément si χ est une fonction de troncature nulle dans un voisinage \mathcal{O} des points $Z_p, p=1, \dots, N_0$, et si $S_1 > 0$ est tel que $d_{E(h)}(x) > S_1$ sur le support de $\nabla\chi(x)$, alors

$$\| (P_{h\nabla+W}^h(h\vec{a}) - E(h)) \chi u^h \| \leq C e^{-S_1/h}.$$

Si Ω est un ouvert régulier tel que $\bar{\Omega}$ contienne le support de χ et tel que $\mathcal{O} \cap \Omega = \emptyset$, d'après ce qui précède, on sait que (2.44) entraîne que la distance de $E(h)$ au spectre de $P_{h\nabla+W}^{h,\Omega}(h\vec{a})$ est plus grande que $\min\{\delta_1 - h^{1-\tau}, 1 - \delta_1 + c_j(M_j); j=1, \dots, N\}$, par conséquent on aura $\|\chi u^h\| \leq h^{-1+\tau} C e^{-S_1/h}$.

Pour tout $p=1, \dots, N_0$, on considère un ouvert \mathfrak{D}_p borné et à frontière régulière tel que \mathfrak{D}_p soit situé d'un seul côté de $\partial\mathfrak{D}_p$ et tel que

$$Z_p \in \mathfrak{D}_p, \quad Z_k \notin \mathfrak{D}_p \quad \text{si } k \neq p \quad \text{et} \quad \mathfrak{D}_p \cap \Gamma = \emptyset.$$

Soit p fixé, \mathfrak{D} désignera dorénavant \mathfrak{D}_p . Soit $(\lambda_{p,k}(h))_k$ la suite décroissante des valeurs propres de $P_{h\nabla+W}^{h,\mathfrak{D}}(h\vec{a})$.

Soit $(e_{p,k})_k$ la suite croissante des valeurs propres de l'oscillateur harmonique $(-\Delta - x \cdot W''(Z_p))x$ sur \mathfrak{D}_0 . On a le théorème suivant.

THÉORÈME 2.6. — *Sous les hypothèses ci-dessus, pour tout entier k fixé, il existe $C_k > 0$ tel que l'on ait*

$$\left| \lambda_{p,k}(h) - \left[-1 + \delta_1 + h\nabla(Z_p) - \frac{1}{2} h e_{p,k} \right] \right| \leq h^2 C_k.$$

Esquisse de démonstration. — On travaille dans une jauge où $\vec{a}(Z_p) = \vec{0}$. Soit $\lambda(h) \in I^0(h)$ une valeur propre de $P_{h\nabla+W}^{h,\mathfrak{D}}(h\vec{a})$ et soit u^h un vecteur propre normé associé. Écrivons u^h dans la décomposition de (2.14),

$u^h = (u_+^h, u_-^h)$. Comme $hV(x) + W(x) - \lambda(h) > 0$ sur \mathfrak{D} , on a

$$(2.45) \left\{ \begin{array}{l} P_{hV+W}^h(h\vec{a})u^h = \lambda(h)u^h \\ \Leftrightarrow u_+^h = -[1 + hV(x) + W(x) - \lambda(h)]^{-1} h\sigma \cdot [D - \vec{a}(x)]u_-^h \\ \text{et} \\ h^2[D - \vec{a}(x)]^2 u_-^h + ih^2[1 + hV(x) + W(x) - \lambda(h)]^{-1} \sigma \cdot \nabla(hV(x) \\ + W(x))\sigma \cdot [D - \vec{a}(x)]u_-^h - h^2\vec{B}(x) \cdot \sigma u_-^h \\ + [1 - (hV(x) + W(x) - \lambda(h))^2]u_-^h = 0. \end{array} \right.$$

($\vec{B}(Z)$ désigne le vecteur champ magnétique en Z).

On vérifie facilement que, si $\vec{a}(x) \equiv \vec{0}$ et pour $\lambda(h)$ réel, si u_+^h et u_-^h sont solutions de (2.45) alors $\sigma_2 \bar{u}_+^h$ et $\sigma_2 \bar{u}_-^h$ sont aussi solutions.

Comme pour établir (2.26), la décroissance exponentielle de u^h , (l'estimation (2.24) est encore valable), et la formule de Taylor montrent que

$$h^2 \Delta u_-^h - [(x - Z_p)W''(Z_p)(x - Z_p) + 2(\lambda(h) - \delta_1 + 1 - hV(Z_p))]u_-^h = \mathcal{O}(h^{2-2\tau}),$$

ce qui permet de conclure aisément que

$$\text{dist} \left\{ -2[\lambda(h) - \delta_1 + 1 - hV(Z_p)], \text{sp}[(-h^2 \Delta - x \cdot W''(Z_p)x)\sigma_0] \right\} = \mathcal{O}(h^{2-2\tau}).$$

Le reste est très facile à vérifier ■

Soit χ une fonction de troncature à support dans un petit voisinage de $\bar{\mathcal{O}}$ et égale à 1 sur \mathcal{O} . On peut appliquer la théorie du paragraphe I à $P_{\chi(hV+W)}^h(h\chi\vec{a})$, les valeurs propres dans $I^0(h)$ de cet opérateur étant exponentiellement proches de celles de $P_{hV+W}^h(h\vec{a})$. Si on cherche la première, (la plus grande), $E(h)$, on l'écrit sous forme de développement asymptotique: $E(h) \approx -1 + \delta_1 + h \sum_{k \geq 0} h^{k/2} E_k$. La fonction propre associée est toujours notée u^h .

On connaît E_0 , $E_0 = V(Z_p) - \frac{1}{2} \text{Tr}((-W''(Z_p))^{1/2})$, ($\text{Tr}(Q)$ désigne la trace de Q). On fait le changement de variable $(x - Z_p) \rightarrow h^{1/2}x$, u_-^h devient u_- et doit satisfaire, d'après (2.45), une équation du type $H^h u_- = 0$ et H^h admet un développement asymptotique de la forme

$$H^h \approx \sum_{k \geq 0} h^{k/2} H_k + 2 \sum_{k \geq 0} h^{k/2} E_k \mathbf{1}_2,$$

$$H_0 = [-\Delta + xW''(Z_p)x - 2V(Z_p)] \mathbf{1}_2,$$

$$H_1 = -2(x \cdot \nabla V(Z_p)) \mathbf{1}_2 + \frac{1}{2} i(\nabla W(Z_p) \cdot \sigma) \sigma D,$$

$$H_2 = -\vec{B}(Z_p) \cdot \sigma - 2[(\nabla \vec{a}(Z_p)x) \cdot D] \mathbf{1}_2 - \frac{1}{4} i(\nabla W(Z_p)x)(\nabla W(Z_p)\sigma) \sigma D + \frac{1}{2} i[(W''(Z_p)x)\sigma] \sigma D + Q_2(x) \mathbf{1}_2,$$

$Q_2(x)$ est un polynôme réel en x de degré 4 dépendant des E_k pour seulement $k < 2$, les autres H_k sont des opérateurs différentiels d'ordre 1, symétriques et à coefficients polynômiaux, dépendant des E_p pour seulement $p < k$.

On prend dans le théorème 1.1 $\mathcal{H}_\infty = \mathcal{P}(x)$ \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_0 est le noyau de $H_0 + 2E_0 \mathbf{1}_2$ et $\mathcal{P}(x)$ l'espace des fonctions polynomiales. L'espace \mathcal{H}_0 est de dimension 2. Si $\vec{B}(Z_p) \neq \vec{0}$, l'opérateur $\Pi_{\mathcal{H}_0} H_2 \Pi_{\mathcal{H}_0}$ n'est pas un multiple de $\Pi_{\mathcal{H}_0}$. On vérifie aisément que l'on a toujours $\Pi_{\mathcal{H}_0} H_{2k+1} \Pi_{\mathcal{H}_0} \equiv 0$, $\forall k \in \mathbb{N}$.

On déduit alors facilement la remarque suivante.

Remarque 2.7. — Sous les hypothèses du théorème 2.6, si $\vec{B}(Z_p) \neq \vec{0}$ alors $\lambda_{p,1}(h)$ et $\lambda_{p,2}(h)$ sont deux valeurs propres simples qui admettent un développement asymptotique $\lambda_{p,k}(h) \approx -1 + \delta_1 + h \sum_{l \geq 0} h^l E_{p,k,l}$, on a

$E_{p,1,0} = E_{p,2,0}$ et $E_{p,1,1} > E_{p,2,1}$. Si $\vec{a}(x) \equiv \vec{0}$, pour une raison de symétrie, on a $\lambda_{p,1}(h) = \lambda_{p,2}(h)$ qui est une valeur propre double.

Méthode B.K.W. — La méthode B.K.W. de [WAN] marche encore pour les petits champs magnétiques. D'après [HE-SJ]₁, il existe un petit voisinage de Z_p , \mathcal{O} , tel qu'il existe une phase réelle, positive et C^∞ , $\varphi(x)$, solution dans \mathcal{O} de l'équation eiconale

$$|\nabla \varphi(x)|^2 = 1 - [1 + W(x) - \delta_1]^2.$$

On cherche u_-^h et $\lambda(h)$ solution de (2.45) sous la forme

$$u_-^h(x) \approx e^{-\varphi(x)/h} \sum_{k \geq 0} h^k u_{-,k}(x) \quad \text{et} \quad \lambda(h) \approx \sum_{k \geq 1} h^k \lambda_k.$$

On écrit les développements asymptotiques suivants :

$$1 - [hV(x) + W(x) - \lambda(h)]^2 \approx [1 - (1 + W(x) - \delta_1)^2] + \sum_{k \geq 1} h^k f_k(x)$$

et

$$[1 + hV(x) + W(x) - \lambda(h)]^{-1} \approx \sum_{k \geq 0} h^k g_k(x), \quad f_k(x) - 2(1 + W(x) - \delta_1) \lambda_k$$

est fonction de λ_p pour seulement $p < k$, ceci si $k > 1$.

Pour que (2.45) soit satisfait pour u_-^h , on doit avoir les équations de transport \mathcal{F}_k :

$$(\mathcal{F}_k) \quad 2 \nabla \varphi(x) \nabla u_{-,k}(x) + q(x) u_{-,k} = t_k(x),$$

avec

$$q(x) := [\Delta \varphi(x) - 2(1 + W(x) - \delta_1)(V(x) - \lambda_1) - 2i \vec{a}(x) \nabla \varphi(x)] \mathbf{1}_2 - 2(\nabla W(x) \sigma)(\nabla \varphi(x) \sigma),$$

$t_0(x) \equiv 0$ et pour $k > 0$, $t_k(x) - f_{k+1}(x) u_{-,0}(x)$ est fonction des λ_p et $u_{-,p-1}$ pour seulement $p \leq k$.

En imposant que $q(Z_p)$ soit nul on trouve $\lambda_1 = -\frac{1}{2}\Delta\varphi(Z_p) + V(Z_p)$, on peut alors construire $u_{-,0}$ dès que l'on se donne sa valeur en Z_p .

On va traiter le cas où $\vec{b}(Z_p) \neq \vec{0}$. L'application

$$A : u_{-,0}(Z_p) \rightarrow t_1(Z_p) - 2\lambda_2 u_{-,0}(Z_p)$$

est linéaire et admet deux valeurs propres μ_+ et μ_- , on prend l'une de ces valeurs propres comme valeur de $\lambda_2/2$ et $u_{-,0}(Z_p)$ le vecteur propre associé, il est alors facile de vérifier que

$$\text{dist} \{ -1 + \delta_1 + h\lambda_1 + h^2\lambda_2, \text{sp}(P_{h\nu+w}^h(h\vec{a})) \} \leq h^3 C.$$

Mais on a vu dans la remarque 2.7 qu'il y a deux valeurs distinctes possibles pour λ_2 , on a donc $\mu_+ \neq \mu_-$. Notons $u_{-,0}^+(x)$ et $u_{-,0}^-(x)$ les fonctions $u_{-,0}(x)$ obtenues à partir des vecteurs propres associés respectivement à μ_+ et μ_- comme valeur en Z_p . On remarque alors facilement que $t_{k+1}(Z_p) = [A - 2\lambda_2]u_{-,k}(Z_p) - f_{k+1}(Z_p)u_{-,0}(Z_p) + v_k$, v_k étant indépendant de $u_{-,k}(Z_p)$. Pour $k > 0$, on écrit $u_{-,k}$ sous la forme :

$$u_{-,k} = u_{-,k}^0 + u_{-,k}^1, \quad \text{avec } u_{-,k}^1(Z_p) = 0$$

et

$$2\nabla\varphi(x)\nabla u_{-,k}^0(x) + q(x)u_{-,k}^0(x) = 0.$$

Il y a une manière unique de choisir $u_{-,k}^0(x)$ comme un multiple de soit $u_{-,0}^+(x)$, si $u_{-,0}(x) = u_{-,0}^-(x)$, soit $u_{-,0}^-(x)$, si $u_{-,0}(x) = u_{-,0}^+(x)$, de façon à ce que $t_{k+1}(Z_p) - f_{k+1}(Z_p)u_{-,0}(Z_p)$ soit colinéaire à $u_{-,0}(Z_p)$, et auquel cas il existe un seul λ_{k+2} tel que $t_{k+1}(Z_p) = 0$. Dans ce cas $u_{-,k+1}^1(x)$ est bien déterminé.

Dans le cas où $\vec{a}(x) \equiv \vec{0}$, on montre facilement que si on écrit que $t_k(Z_p) = G_k u_{-,0}(Z_p)$, alors l'application G_k est linéaire et commute avec $v \rightarrow \sigma_2 v$ et donc G_k est un multiple de l'identité $\mathbf{1}_2$, cette dernière propriété permet un choix unique de E_{k+1} de façon à ce que $t_k(Z_p) = 0$.

On a montré la proposition suivante.

PROPOSITION 2.8. — *Sous les hypothèses de la remarque 2.7, à chacune des deux valeurs propres $\lambda_{p,j}(h)$, $j = 1, 2$, on peut trouver une fonction propre associée $u_{p,j}^h(x)$ ayant un développement asymptotique de la forme*

$$u_{p,j}^h(x) \approx e^{-\varphi_p(x)/h} \sum_{k \geq 0} h^k u_{p,j,k}(x)$$

dans le sens où, pour tout entier m et pour tout x ,

$$[P_{h\nu+w}^h(h\vec{a}) - \lambda_{p,j}(h)](e^{-\varphi_p(x)/h} \sum_{k=0}^m h^k u_{p,j,k}(x)) = \mathcal{O}(h^{m+1} e^{-\varphi_p(x)/h}).$$

— Si $\vec{a}(x) \equiv \vec{0}$, alors on a $\lambda_{p,1}(h) = \lambda_{p,2}(h)$ et $u_{p,2}^h = J u_{p,1}^h$, ces deux vecteurs propres admettent un développement asymptotique comme ci-dessus.

« Splitting » dans le cas du double puits. — On suppose que $V(x)$ et $W(x)$ sont symétriques par rapport à un plan Σ de \mathbb{R}^3 , de normale \vec{n} :

$$(2.46) \quad \left\{ \begin{array}{l} V(x' + t\vec{n}) = V(x' - t\vec{n}) \quad \text{et} \quad W(x' + t\vec{n}) = W(x' - t\vec{n}), \\ \forall (x', t) \in \Sigma \times \mathbb{R}. \end{array} \right.$$

On suppose en plus que $W(x)$ atteint son maximum δ_1 en 2 points Z_1 et Z_2 . Soit alors $d(\cdot, \cdot)$ la distance d'Agmon associée à la métrique $[1 - (1 + W(x) - \delta_1)^2] dx^2$.

On fait l'hypothèse géométrique de [HE-SJ]₂ suivante.

$$(2.47) \quad \left\{ \text{Il existe une unique géodésique reliant } Z_1 \text{ à } Z_2. \right.$$

Soit $S'_0 := d(Z_1, Z_2)$.

On suppose que l'on a

$$(2.48) \quad d(Z_p, M_j) > S'_0, \quad \forall j = 1, \dots, N, \quad \text{et} \quad \forall p = 1, 2,$$

et que le champ magnétique est parallèle à \vec{n} et symétrique par rapport à Σ :

$$(2.49) \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{B}(x) = b(x)\vec{n} \quad \text{où} \quad b \in C^\infty(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}) \\ \text{et} \\ b(x' + t\vec{n}) = b(x' - t\vec{n}), \quad \forall (x', t) \in \Sigma \times \mathbb{R}. \end{array} \right.$$

Cette dernière hypothèse entraîne que $\vec{n} \nabla b(x) \equiv \vec{0}$.

On remarque alors que si $\vec{a}(x)$ est un potentiel magnétique sur \mathbb{R}^n , pour tout $y \in \mathbb{R}^n$, le potentiel magnétique $\vec{c}(y; x)$ suivant engendre le même champ magnétique :

$$(2.50) \quad \left\{ \begin{array}{l} c_1(y; x) \equiv 0 \quad \text{et pour } j = 2, \dots, n, c_j(y; x) \\ = \sum_{k=1}^{j-1} \int_{y_k}^{x_k} b_{k,j}(y_1, \dots, y_{k-1}, t, x_{k+1}, \dots, x_n) dt, \end{array} \right.$$

avec $b_{k,j}(x) := \partial_{x_k} a_j(x) - \partial_{x_j} a_k(x)$.

On en déduit que (2.49) permet de choisir $\vec{a}(x)$ tel que

$$\vec{a}(0) = \vec{0}, \quad \vec{a}(x)\vec{n} \equiv 0 \quad \text{et} \quad \vec{n} \nabla \vec{a}(x) \equiv \vec{0}.$$

On vérifie alors aisément que l'on peut choisir deux ouverts \mathcal{O}_p , $p = 1, 2$, symétriques par rapport à Σ , voisinages respectifs de Z_p et tels que leur intersection soit un voisinage de l'origine ne contenant aucun des Z_p ni aucun de M_j .

Soit alors $\lambda_{p,j}(h)$ les deux premières valeurs propres < 0 de $P_h^h \mathcal{O}_{p,w}^p(h\vec{a})$ et $u_{p,j}^h(x)$ les vecteurs propres normés associés.

Comme dans le théorème 2.4, la matrice K , de $P_h^h \mathcal{V}_{p,w}(\vec{a})$ restreinte à l'image du projecteur spectral sur

$$\{ -1 + \delta_1 + h(V(Z_1) - 1/2 e_{1,1}) \} +] - h^2 C, h^2 C[$$

et associée à une base convenablement choisie, vérifie l'équivalent de (2.36) avec S'_0 à la place de S_0 ; ($e_{1,1}$ est celui du théorème 2.6 et $C > 0$ est supposé choisi assez grand).

On a aussi (2.41) avec $\Sigma_{1,2} = \mathcal{O}_1 \cap \mathcal{O}_2 \cap \Sigma$ et de plus, comme dans le cas particulier traité dans [HA-KL], les opérateurs $P_{hV+W}^{h,\mathcal{O}_1}(\vec{a})$ et $P_{hV+W}^{h,\mathcal{O}_2}(\vec{a})$ sont unitairement équivalents, on a

$$(2.51) \quad \lambda_{1,j}(h) = \lambda_{2,j}(h), \quad \forall j.$$

Pour se convaincre de (2.51), on fait le changement de variable $x \rightarrow y$ relatif à une nouvelle base orthonormée sur \mathbb{R}^3 , (e_1, e_2, e_3), avec $e_3 = \vec{n}$. $P_{hV+W}^{h,\mathcal{O}_1}(\vec{a})$ devient alors

$$S_i^h = \alpha' \cdot (hD_y - \vec{a}') + \beta + (hV_i + W_i), \quad \text{où } \alpha' = (\alpha'_1, \alpha'_2, \alpha'_3),$$

$$\alpha'_j = \begin{pmatrix} 0 & e_j \sigma \\ e_j \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad j = 1, 2, 3; \quad (hV_i + W_i) = (hV + W)/\mathcal{O}_i,$$

les α'_j vérifient les mêmes propriétés que les α_j et le potentiel magnétique \vec{a}' engendre le même champ magnétique que celui de \vec{a} . Si maintenant on fait la transformation $y_3 \rightarrow -y_3$ associée à une translation de façon à ce que \mathcal{O}_2 devienne \mathcal{O}_1 , l'opérateur S_2^h devient $S_{1,2}^h$, $S_{1,2}^h$ est défini comme S_1^h avec $-\alpha'_3$ à la place de α'_3 . On fait alors le changement de spineur $u \rightarrow v$, $v = (v^+, v^-) \in (\mathbb{C}^2)^2$ avec $v^\pm = \pm (e_3 \sigma) u^\pm$, ce changement de spineur respecte les conditions aux limites et transforme $S_{1,2}^h$ en S_1^h .

On montre alors facilement comme dans le cas de l'opérateur de Schrödinger, (nous nous référons au calcul du «splitting» de [HE-SJ]₂, (voir aussi [HEL]), que, pour tout $N_2 > 0$, il existe N_3 tel que l'on puisse remplacer dans (2.41), modulo un $\mathcal{O}(h^{N_2} e^{-S'_0/h})$, $u_{p,j}^h(x)$ par

$$c(h) e^{i\vec{a}'(Z_p) \cdot (x - Z_p)} e^{-\Phi_p(x)/h} \sum_{k=0}^{N_3} h^k u_{p,j,k}^h(x).$$

($c(h)$ est une constante de normalisation de la norme $(L^2(\mathbb{R}^3))^4$).

En utilisant (2.45), on peut écrire $u_{p,j}^{h,+}$ en fonction de $u_{p,j}^{h,-}$, si $u_{p,j}^h = (u_{p,j}^{h,+}, u_{p,j}^{h,-})$, et estimer (2.41), on en déduit alors facilement comme dans [HE-SJ]₂ le théorème.

THÉORÈME 2.9. — *Sous les hypothèses (2.46)-(2.49) et celles du théorème 2.6, on a les propriétés suivantes sur les 4 plus grandes valeurs propres < 0 de $P_{hV+W}^{h,\vec{a}}$, $E_j^-(h), j = 1, \dots, 4$.*

Si $\vec{B}(Z_1) \neq \vec{0}$, les valeurs propres $E_j^-(h), j = 1, \dots, 4$, sont toute simples. $E_1^-(h)$ a le même développement asymptotique que $\lambda_{p,1}(h), p = 1$ et 2, dans la remarque 2.7, et $E_3^-(h)$ a celui de $\lambda_{p,2}(h)$. Les «splitting» $\Delta_k(h) := E_{2k}^-(h) - E_{2k-1}^-(h), k = 1, 2$, ont un développement asymptotique de

la forme

$$\Delta_k(h) \approx e^{-2S_0/h} h^{1/2} \sum_{l \geq 0} \Delta_{k,l} h^l, \quad \text{avec} \quad \Delta_{k,0} > 0, \quad k=1,2.$$

Si $\vec{a}(x) \equiv \vec{0}$, alors $E_{2k}^-(h) = E_{2k-1}^-(h)$, $k=1,2$, et si $\Delta_0(h)$ désigne le « splitting », $\Delta_0(h) := E_3^-(h) - E_2^-(h)$, il admet un développement asymptotique comme ci-dessus.

3. APPLICATION A L'OPÉRATEUR DE DIRAC EN LIMITE RELATIVISTE

3.1. Cas d'un seul puits. Application du paragraphe I

On se place sous les hypothèses (2.1)-(2.3) du paragraphe 2.1 mais avec $N=1$. Plus précisément on prend

$$(3.1) \quad V(x) = c_0(x) + c_1(x)/|x|, \quad \text{avec} \quad -\frac{1}{2} < c_1(0) < 0.$$

On suppose en plus qu'il existe un entier $n_0 > 0$ tel que, pour tout multi-indice γ , $|\gamma| \geq n_0$, il existe C_γ tel que

$$(3.1') \quad |\partial_x^\gamma c_0(x)| + |\partial_x^\gamma c_1(x)| + |\partial_x^\gamma W(x)| + |\partial_x^\gamma \vec{a}(x)| \leq C_\gamma.$$

Dans la pratique, la décroissance exponentielle des vecteurs propres donnée par (2.19) et (2.24) permet de se limiter à un ouvert borné; on peut alors supposer que les c_i et les a_i sont à support compact et C^∞ , dans ce cas (3.1') est vérifié si on prend $n_0 = 1$.

Quitte à changer de jauge, on peut supposer que

$$(3.2) \quad \vec{a}(0) = \vec{0}.$$

On fait le changement de variable $h^{-1}x \rightarrow x$, l'opérateur $P_h^{h\nu+W}(\vec{a})$ devient alors

$$H^h := \sum_{j=1}^3 \alpha_j (D_j - a_j(hx)) + \beta + c_0(hx) + \frac{c_1(hx)}{|x|} + W(hx).$$

On a alors H^h qui admet un développement asymptotique $H^h \approx \sum_{j \geq 0} h^j H_j$,

avec $H_0 u = \alpha \cdot D u + \beta u + (W(0) + c_1(0)/|x|) u$ et pour $j \geq 1$,

$$H_j u = -\alpha \left(\sum_{|\gamma|=j} \frac{1}{\gamma!} x^\gamma \cdot \partial_x^\gamma \vec{a}(0) \right) u + \left(\sum_{|\gamma|=j} \frac{1}{\gamma!} x^\gamma \left(\partial_x^\gamma W(0) + \frac{\partial_x^\gamma c_1(0)}{|x|} \right) \right) u + \sum_{|\gamma|=j-1} \frac{1}{\gamma!} x^\gamma \partial_x^\gamma c_0(0) u.$$

Pour l'instant, on prend

$$\mathcal{D}(H_0) = (H^1(\mathbb{R}^3))^4 \quad \text{et} \quad \mathcal{D}(H_j) = \mathcal{D}(R_j) = \{u \in \mathcal{H}; |x|^j u \in \mathcal{H}\}$$

si $j > 0$, ceci pour donner un sens au développement asymptotique.

Le spectre discret de H_0 est formé des valeurs propres

$$(3.3) \quad W(0) + E_{n',k}, E_{n',k} := [1 + \tau^2 (n' + (k^2 - \tau^2)^{1/2})^{-2}]^{-1/2},$$

avec

$$\tau := -c_1(0) \quad \text{et} \quad (n', k) \in \{\mathbb{N}^* \times \mathbb{Z}^*\} \cup \{0\} \times \mathbb{Z}^*.$$

$E = W(0) + E_{n',k}$ est de multiplicité $2|k|$, et donc, si $n' \neq 0$, E est en fait de multiplicité $4|k|$. En coordonnées polaires, les vecteurs propres associés normalisés sont de la forme

$$u_{k,m}(x) = r^\lambda e^{-ar} \begin{Bmatrix} u_k^+(r) \Psi_{k,m}^+(\varphi, \theta) \\ u_k^-(r) \Psi_{k,m}^-(\varphi, \theta) \end{Bmatrix},$$

$$\lambda = (k^2 - \tau^2)^{1/2} \quad \text{et} \quad a = (1 - E_{n',k}^2)^{1/2},$$

où $ru_k^+(r)$ et $ru_k^-(r)$ sont des polynômes en r de degré n' solutions du système

$$(3.4) \quad \begin{cases} \frac{d}{dr} v^+ + \left(\frac{\lambda \mp (j+1/2)}{r} - a \right) v^+ = \left(\frac{\tau}{r} + E_{n',k} + 1 \right) v^- \\ \frac{d}{dr} v^- + \left(\frac{\lambda \pm (j+1/2)}{r} - a \right) v^- = \left(-\frac{\tau}{r} - E_{n',k} + 1 \right) v^+, \\ \text{si } j = l \pm \frac{1}{2}; \end{cases}$$

avec la convention que : $l = k$ et $j = l - \frac{1}{2}$ si $k > 0$, $l = -k - 1$ et $j = l + \frac{1}{2}$ si

$k < 0$. Les indices m parcourent l'intervalle de $\frac{1}{2} + \mathbb{Z}$,

$$\left\{ -j, -j+1, \dots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, j-1, j \right\}.$$

La base orthonormée sur $L^2(S^2)$ des fonctions harmoniques sphériques, $(Y_{l,p})$, définissent les $\Psi_{k,m}^\pm$ de la façon suivante :

$$\Psi_{k,m}^+(\varphi, \theta) := \begin{cases} c\left(l, j, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) Y_{l, m-1/2}(\varphi, \theta) \\ c\left(l, j, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) Y_{l, m+1/2}(\varphi, \theta) \end{cases}$$

et $\Psi_{k,m}^-(\varphi, \theta) = \frac{x}{r} \cdot \sigma \Psi_{k,m}^+(\varphi, \theta)$,

avec la convention que $Y_{l, l+1} = Y_{l, -l-1} = 0$ et que

$$c(l, j, m - m_1, m_1) = \begin{cases} \pm \left(\frac{l \pm m + 1/2}{2l + 1}\right)^{1/2}, & \text{si } j = l \pm \frac{1}{2} \text{ et } m_1 = \frac{1}{2} \\ \left(\frac{l \mp m + 1/2}{2l + 1}\right)^{1/2}, & \text{si } j = l \pm \frac{1}{2} \text{ et } m_1 = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Nous renvoyons à [BE-SA] pour plus de précision.

Notons \mathcal{H}_0 le sous-espace propre associé à une valeur propre $E = W(0) + E_{n',k}$. Pour $i = 0, 1$, on considère le sous-espace

$$H_i^\infty = \{u \in (H^i(\mathbb{R}^3))^4 \cap C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}); \exists s \in \mathbb{R} \text{ tel que } \langle x \rangle^s e^{ar} u \in (H^i(\mathbb{R}^3))^4\}.$$

On a bien $\mathcal{H}_0 \subset H_1^\infty \subset H_0^\infty$ et la propriété suivante.

LEMME 3.1. — Si $f \in H_0^\infty \cap \mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_0$, alors

$$(H_0 - E)^{-1} f \in H_1^\infty.$$

Preuve. — Soit $u = (H_0 - E)^{-1} f$. On a évidemment $u \in (H^1(\mathbb{R}^3))^4$. Soit $s > 0$ tel que $s > \tau E/a$ et tel que $\langle x \rangle^{-(s-1/2)} e^{ar} f \in \mathcal{H}$.

On considère la phase $\varphi(x) = ar - s \times \ln(r+1)$, $r = |x|$. On applique (2.15) avec $V(x) = -E - \tau/r$ et $h = 1$ et on a facilement que

$$\|D(\vec{0}) e^\varphi u\|^2 + 2(as - \tau E) \|r^{-1/2} e^\varphi u\|^2 - \tau^2 \|r^{-1} e^\varphi u\|^2 \leq C (\|r^{-1/2} u\|^2 + \|r^{1/2} e^\varphi f\| \times \|r^{-1/2} e^\varphi u\|).$$

De là on obtient facilement que $\|D(\vec{0}) e^\varphi u\| + \|r^{-1/2} e^\varphi u\| \leq C$. On a montré que si $s > \tau E/a$ et si $f \in \mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_0$ vérifie $\langle x \rangle^{-(s-1/2)} e^{ar} f \in \mathcal{H}$ alors $\langle x \rangle^{-(s+1/2)} e^{ar} (H_0 - E)^{-1} f \in (H^1(\mathbb{R}^3))^4$ ■

Les hypothèses (1.1)-(1.3)_{iii} seront donc vérifiées si on prend $\mathcal{H}_\infty = \mathcal{H}_\infty^1 = H_1^\infty$.

Exemple 3.2. — Sous les hypothèses précédentes, si le champ magnétique $\vec{B}(x) = \nabla \times \vec{a}(x)$ vérifie $\vec{B}(0) \neq \vec{0}$, alors, pour tout $h > 0$ assez petit, les deux premières valeurs propres $\lambda_1(h)$ et $\lambda_2(h)$ de $P_{hV+W}^h(\vec{a})$ sont simples; de

plus il existe $C > 0$ tel que, pour tout $h > 0$ assez petit, on ait $C^{-1} h \leq \lambda_2(h) - \lambda_1(h) \leq h C$.

Pour s'en convaincre, il suffit d'appliquer le théorème 1.1 avec l'hypothèse (1.3)_{ii} et de vérifier que la matrice de $\Pi_{\mathcal{H}_0} H_1 \Pi_{\mathcal{H}_0}$ dans la base $\{u_{1, 1/2}, u_{1, -1/2}\}$ est égale, modulo un multiple de l'identité et modulo une constante multiplicative, à

$$\begin{pmatrix} b_3 & b_2 + ib_1 \\ b_2 - ib_1 & -b_3 \end{pmatrix}, \quad \text{si } \vec{B}(0) = (b_1, b_2, b_3).$$

Exemple 3.3. — Sous les hypothèses précédentes, si $\vec{B}(0) \neq \vec{0}$, alors pour tout $h > 0$ assez petit, les deux premières valeurs propres de $P_{h\nu+W}^h(h\vec{a})$ sont simples et il existe $C > 0$, tel que, pour tout $h > 0$ assez petit, on ait $h^2 C^{-1} \leq \lambda_2(h) - \lambda_1(h) \leq h^2 C$.

C'est encore comme précédemment le théorème 1.1, si

$$\nabla c_1(0) = \nabla W(0) = \vec{0},$$

si non c'est une application du théorème 1.2. Dans la deuxième situation, pour vérifier que la matrice K'_2 dans (1.27)_{ii} n'est pas égale à un multiple de l'identité, il suffit de remarquer que H_0 et H_1 commutent avec l'opérateur anti-symétrique J défini dans (2.14) et donc, modulo un multiple de l'identité, K'_2 est égale à $\Pi_{\mathcal{H}_0} H_2 / \mathcal{H}_0$.

3.2. *Effet tunnel.* — On conserve les hypothèses du paragraphe 3.1 et on se place dans une situation de limite relativiste, $W(x) = 0$. Pour tout τ fixé, $0 < \tau < 1$, la distance d'Agmon modifiée vérifie

$$[(1 - \tau^2)^{1/2} - hC] |x| \leq d_\tau(0, x) \leq [(1 - \tau^2)^{1/2} + hC] |x|.$$

On considèrera seulement les petits champs magnétiques, c'est-à-dire que l'on aura $h\vec{a}(x)$ à la place de $\vec{a}(x)$. On aura besoin de quelques inégalités d'énergie précisées.

Soit $E_0 := E_{n, k}$ une valeur propre donnée de H_0 et soit $E(h)$ une valeur propre de $P_{h\nu}^h(h\vec{a})$ telle que $|E(h) - E_0| \leq hC$.

Soit $u^h(x)$ un vecteur propre associé à $E(h)$ et normalisé.

On considère la phase

$$(3.5) \quad \varphi^h(x) = \psi_{\eta_0, \eta_1}^h(r) := (1 - E_0^2)^{1/2} r - h \eta_0 r - h \varphi_{\eta_1}^h(r), \quad \text{avec } r = |x|$$

et

$$\varphi_\Lambda^h(t) = [\tau E_0 (1 - E_0^2)^{-1/2} - \Lambda^{-1/2}] \ln(t/(h\Lambda)), \quad \text{si } t \geq h\Lambda,$$

et

$$\varphi_\Lambda^h(t) = 0, \quad \text{si } t \leq h\Lambda, (\tau = -c_1(0)).$$

On choisit $\eta_0 > 1$ et assez grand et $\eta_1 > \eta_0 : 1 \ll \eta_0 < \eta_1 \ll h^{-1}$.

PROPOSITION 3.4. — Il existe $C > 0$ indépendant de h , tel que, si $\eta_0 > 1$ est choisi assez grand, alors on a la propriété suivante.

Pour tout $f \in \mathcal{H} \ominus \text{Ker}(\mathbf{P}_{h \mathbf{V} - \mathbf{E}(h)}^h(\vec{h}\vec{a}))$ tel que $e^{\phi^h/h} f \in \mathcal{H}$, si $v^h \in (\mathbf{H}^1(\mathbb{R}^3))^4$ est tel que $\mathbf{P}_{h \mathbf{V} - \mathbf{E}(h)}^h(\vec{h}\vec{a}) v^h = f$, alors

$$(3.6) \quad h^2 \| \mathbf{D}(\vec{a}) e^{\phi^h/h} v^h \|^2 + h \| e^{\phi^h/h} v^h \|^2 \leq C (\| v^h \|^2 + h^{-1} \| e^{\phi^h/h} f \|^2).$$

Preuve. — Soit $\Lambda > 0$, on fait la démonstration avec $\psi_\Lambda^h(x)$ défini par $\psi_\Lambda^h(x) = \varphi^h(x)$, si $\varphi^h(x) \leq \Lambda$, et $\varphi^h(x) = \Lambda$ autrement; après on fait tendre Λ vers l'infini.

Soit $\chi_\Lambda(t)$ la fonction caractéristique de l'intervalle $]h, \Lambda, +\infty[$. En utilisant le fait que $1 < \eta_0 < \eta_1 < h^{-1}$ et l'inégalité $h r^{-1} \chi_{\eta_1}(r) \leq 1/\eta_1$, on remarque aisément que

$$\begin{aligned} 1 - |\nabla \varphi^h(x)|^2 - (h \mathbf{V}(x) - \mathbf{E}(h))^2 &\geq 2 h \eta_0 (1 - \mathbf{E}_0^2)^{1/2} \\ &\quad - h C_0 - 2 h \mathbf{E}_0 \tau r^{-1} (1 - \chi_{\eta_1}(r)) \\ &\quad + h [(1 - \mathbf{E}_0^2)^{1/2} \eta_1^{-1/2} - C_1 \eta_1^{-1}] \chi_{\Lambda_1}(r) r^{-1} \\ &\quad - (h \tau r^{-1})^2 - h^2 \eta_0 C_2 - C_3 h^2 r^{-1}, \end{aligned}$$

où les $C_i, i=0, 1, 2, 3$, sont des constantes > 0 indépendantes de h, η_0 et de η_1 . Pour résorber le terme $2 h \mathbf{E}_0 \tau r^{-1} (1 - \chi_{\eta_1}(r))$, on utilise l'inégalité suivante :

$$h \| r^{-1/2} u \|^2 \leq h [\| \mathbf{D}(\vec{a}) u \| + C \| u \|] \times \| u \|,$$

pour des $u \in (\mathbf{H}^1(\mathbb{R}^3))^4$ et à support inclus par exemple dans celui de $1 - \chi_{\eta_1}(r)$. On l'applique à $\chi^h e^{\phi^h/h} v^h$ où χ^h est une fonction de troncature à support inclus dans celui de $1 - \chi_{2\eta_1}(r)$ et qui vaut 1 dans celui de $1 - \chi_{\eta_1}(r)$. On en déduit qu'il existe $C > 0$ tel que, pour tout $\varepsilon, 0 < \varepsilon < 1$, on ait

$$h \| r^{-1/2} \chi^h e^{\phi^h/h} v^h \|^2 \leq \frac{1}{2} \varepsilon h^2 \| \mathbf{D}(\vec{a}) e^{\phi^h/h} v^h \|^2 + \varepsilon^{-1} C \| v^h \|^2.$$

Cette inégalité, avec par exemple $\varepsilon = \frac{1}{2}(1 - 4\tau^2)$, (2.7) et (2.15) permettent de voir aisément que

$$\begin{aligned} h^2 \| \mathbf{D}(\vec{a}) e^{\phi^h/h} v^h \|^2 + \frac{1}{2} h \eta_0 \| e^{\phi^h/h} v^h \|^2 \\ \leq C [\| v^h \|^2 + \| e^{\phi^h/h} f \| (\| (h \mathbf{V} - \mathbf{E}(h)) e^{\phi^h/h} v^h \| + \| \nabla \varphi^h \alpha e^{\phi^h/h} v^h \|)]. \end{aligned}$$

En utilisant l'inégalité

$$\begin{aligned} \| e^{\phi^h/h} f \| (\| (h \mathbf{V} - \mathbf{E}(h)) e^{\phi^h/h} v^h \| + \| \nabla \varphi^h \alpha e^{\phi^h/h} v^h \|) \\ \leq h^{-1} \| e^{\phi^h/h} f \|^2 + h (\| (h \mathbf{V} - \mathbf{E}(h)) e^{\phi^h/h} v^h \|^2 + \| \nabla \varphi^h \alpha e^{\phi^h/h} v^h \|^2), \end{aligned}$$

on arrive à conclure aisément en appliquant de nouveau (2.7) à $\chi^1 e^{\phi^h/h} v^h$ pour résorber le terme $h \| h \mathbf{V} e^{\phi^h/h} v^h \|^2$, les autres termes se négligent compte tenu du fait que h est très petit devant η_0 ■

Remarque 3.5. — La proposition 3.4 est encore valable si on travaille sur un ouvert Ω régulier et borné, i.e. si on remplace $P_{hV}^h(h\vec{a})$ par $P_{hV}^{h,\Omega}(h\vec{a})$.

Dans le cas où il y a une symétrie, l'estimation (3.6) permet seulement d'avoir une majoration de l'écart entre deux valeurs propres différentes mais asymptotiquement proches. La minoration peut s'obtenir dans le cas du niveau fondamental mais avec une hypothèse supplémentaire, comme nous allons le voir.

On suppose que

$$(3.7) \quad \nabla c_1(0) = \vec{0};$$

l'opérateur H_1 est un multiple de l'identité, on peut donc le considérer comme nul. On considère donc une valeur propre, $E(h) \sim \sum_{j \geq 0} h^j E_j$, proche du niveau fondamental,

$$(3.8) \quad E_0 = (1 - \tau^2)^{1/2}, \quad (\tau = -c_1(0)).$$

On a alors grâce à (3.7)

$$(3.9) \quad E_1 = c_0(0).$$

On cherche un vecteur propre u associé à $E(h)$. On écrit que

$$P_{hV}^h(h\vec{a})u = E(h)u \Leftrightarrow \begin{cases} h\sigma D(\vec{a})u_- + (1 + hV - E^h)u_+ = 0 \\ h\sigma D(\vec{a})u_+ - (1 + E^h - hV)u_- = 0 \end{cases} \\ \Leftrightarrow \begin{cases} u_- = hrs^h \sigma D(\vec{a})u_+ \\ R^h u_+ = 0; \end{cases}$$

avec

$$s^h(x) = [(1 + E^h)r - hrc_0(x) - hc_1(x)]^{-1}, \quad (rs^h = (1 + E^h - hV)^{-1}),$$

et

$$R^h u_+ := h^2 [\sigma D(\vec{a})]^2 u_+ - ih^3 rs^h (\nabla V \sigma) (\sigma D(\vec{a}) u_+) + [1 - (E^h - hV)^2] u_+.$$

Remarquons que la fonction $s^h(x)$ est C^∞ et > 0 , on a en plus

$$(3.10) \quad hs^h(x) + rs^h(x) \leq C.$$

On cherche u_+ , sous la forme $u_+(x) = e^{-\Psi^h(x)/h} v_+(x)$. On prend comme phase $\Psi^h(x) = \tau r + h[\Psi_1(x) + r\Psi_0(x)]$, avec les Ψ_i qui s'écrivent en coordonnées polaires

$$\Psi_1(x) = E_0 \tau^{-1} \int_0^r c_1^0(\rho, \varphi, \theta) \rho^{-1} d\rho$$

et

$$\Psi_0(x) = r^{-1} E_0 \tau^{-1} \int_0^r c_0^0(\rho, \varphi, \theta) d\rho;$$

$$c_i^0(x) = c_i(x) - c_i(0), \text{ pour } i=0, 1.$$

Les Ψ_i sont C^∞ et de plus

$$\Psi_i(0) = 0, \quad i=0, 1, \quad \text{et} \quad \nabla \Psi_1(0) = \vec{0};$$

cette dernière propriété étant due à (3.7).

On écrit que

$$e^{\Psi^h/h} R^h u_+ = 2h \partial_r v_+ + 2h^2 \nabla \varphi_1 \nabla v_+ - h^3 r s^h (\nabla \nabla \sigma) \sigma \nabla v_+ - h^2 \Delta v_+ + h^2 M^h v_+;$$

$$M^h = M^h(x) = [\Delta \varphi_1 - |\nabla \varphi_1|^2 + |\vec{a}|^2 - \text{id } i v(\vec{a}) - \tau^2 r^{-2} - (r^{-1} c_1^0 + c_0^0)^2 - 2 E_0 E_2^h] \mathbf{1}_2 + h [r s^h (\nabla \nabla \sigma) (\nabla \varphi_1 \sigma) - i r s^h (\nabla \nabla \sigma) (\vec{a} \sigma) + 2 E_2^h (r^{-1} c_1 + c_0^0) \mathbf{1}_2 - h^2 (E_2^h)^2 \mathbf{1}_2];$$

on a noté $\varphi_1 = \Psi_1 + r \Psi_0$ et $E_2^h = h^{-2} (E^h - E_0 - h E_1)$.

Dans $M^h(x)$ on néglige les termes qui sont un $\mathcal{O}(hr^{-1})$ dans un voisinage de l'origine. Compte tenu de (3.2), (3.10) et des propriétés des Ψ_i , on vérifie que l'on a

$$M^h(x) = M_0^h(x) + M_1^h(x) + M_2^h(x), \quad \text{avec} \quad M_2^h(x) = \mathcal{O}(hr^{-1})$$

et

$$M_0^h(x) = T_0(x) + \sum_{j=1}^2 r^{-j} [T_j^0(x) + r s^h T_j^1(x)];$$

les matrices T_j^i et T_0 sont à coefficients C^∞ et T_j^i s'annule à l'ordre j en 0. Le seul terme qui, pour l'instant, n'est pas de l'une des formes ci-dessus est

$$M_1^h(x) := r^{-2} [1 - E_0 - (1 - E_0)^2 - \tau^2 + r \tau^2 s^h + h \tau s^h (1 - E_0)] \mathbf{1}_2.$$

On vérifie aisément que

$$M_1^h(x) = r^{-2} [E_0 - 1 + h \tau s^h (1 - E_0) + \tau^2 r s^h] \mathbf{1}_2 = \{ s^h r^{-2} (1 - E_0) [-(1 + E^h) r + h c_0 + h c_1^0] + \tau^2 r^{-1} s^h \} \mathbf{1}_2 = \{ h s^h r^{-1} (E_0 - 1) (h E_2^h - c_0^0) + h s^h (1 - E_0) r^{-2} c_1^0 \} \mathbf{1}_2.$$

Comme grâce à (3.7), c_1^0 s'annule à l'ordre 2 en 0, on a aussi $M_1^h(x) = \mathcal{O}(hr^{-1})$. On prend $v_+ = v_0^+ + h v_1^+$, avec v_0^+ tel que $\nabla v_0^+(x) \equiv 0$, et

$$v_1^+(x) = -(2\tau)^{-1} \int_0^r M_0^h(\rho, \varphi, \theta) v_0^+ d\rho.$$

On vérifie alors aisément que v_1^+ est C^∞ dans $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$, hölderien dans \mathbb{R}^3 et que ∇v_1^+ et $r \Delta v_1^+$ sont bornés au voisinage de $\{0\}$. On pose u_i ,

pour $i = 0, 1$, le vecteur défini par

$$u_i = (u_i^+, u_i^-) : u_i^+(x) = e^{-\Psi^h/h} v_i^+ \quad \text{et} \quad u_i^- = h r s^h \sigma D(\vec{a}) u_i^+.$$

On a

$$(3.11) \quad |P_{h \vee -E(h)}^h(h\vec{a})(u_0 + hu_1)(x)| = r s^h(x) |R^h(u_0^+ + hu_1^+)(x)| \\ \leq h^3 s^h |v_0^+| r^{\lambda-1} e^{-\tau r/h} C_\rho, \quad \forall x, |x| \leq \rho,$$

avec C_ρ qui est une constante > 0 ne dépendant que de ρ , (ici $\lambda = E_0$).

Soit maintenant Ω un ouvert régulier et borné qui est un voisinage de $\{0\}$. Soit $\rho_1 > 0$ tel que $Q(\rho_1) := \{x; |x| < \rho_1\} \subset \Omega$ et soit un hyperplan Σ dont la distance ρ_0 à $\{0\}$ vérifie $\rho_0 < \rho_1$, ($\rho_0 = \inf\{|x|; x \in \Sigma\}$).

Soit u^h un vecteur propre de $P_{h \vee}^{h, \Omega}(h\vec{a})$ associé à une valeur propre λ^h qui est asymptotiquement proche de E^h , on peut supposer que l'on a simplement $|\lambda^h - E^h| \leq h^3 C$. On suppose que $\|u^h\| = 1$.

On considère une fonction de troncature régulière χ telle que :

$$0 \leq \chi(x) \leq 1, \quad \chi(x) = 1 \quad \forall x \in Q(\rho_1) \quad \text{et} \quad \text{supp}(\chi) \subset \Omega.$$

Soit $w^h(x) = \chi(x)(u_0(x) + hu_1(x))$. On peut choisir v_0^+ tel que $\langle w^h | u^h \rangle = 1$, on a alors $\|u^h - w^h\| \leq h C$. Comme on a

$$(3.12) \quad \|P_{h \vee -E(h)}^h(h\vec{a}) w^h\| \leq h^2 C,$$

on a en fait

$$(3.13) \quad \|u^h - w^h\| \leq h^2 C.$$

On a le lemme suivant.

LEMME 3.6. — *Sous les hypothèses précédentes, on a*

$$\|u^h - w^h\|_{L^2(\Sigma)}^2 \leq C h^{3/2-2} \eta_1^{-1} (h^{-2 E_0} e^{-2 \rho_0/h});$$

(remarquons que η_1 peut être choisi très grand, on supposera donc que $\frac{1}{2} - 2 \eta_1^{-1} \geq 0$).

Preuve. — On applique (3.6), avec $\phi^h = \Psi^{h, \eta} : \Psi^{h, \eta}(x) := \phi_{\eta/h}^h(x)$, ϕ_λ^h est celui défini dans la démonstration de la proposition 3.4; $\eta > 0$ est choisi tel que $\rho_0 < \eta \tau^{-1} < \rho_1$. En utilisant le fait que u^h est une fonction propre et le fait que $\Psi^{h, \eta}/h$ est borné sur $Q(hC)$, on a

$$\|e^{\Psi^{h, \eta}/h} P_{h \vee -\lambda(h)}^h(h\vec{a})(u^h - w^h)\|^2 \\ \leq C \int_{|x| \leq hC} |P_{h \vee -\lambda(h)}^h(h\vec{a})(u^h - w^h)|^2 dx \\ + \int_{|x| \geq hC} |e^{\Psi^{h, \eta}/h} P_{h \vee -\lambda(h)}^h(h\vec{a})(u^h - w^h)|^2 dx \\ \leq C \|P_{h \vee -\lambda(h)}^h(h\vec{a})(u^h - w^h)\|^2 \\ + \int_{|x| \geq hC} |e^{\Psi^{h, \eta}/h} P_{h \vee -\lambda(h)}^h(h\vec{a}) w^h|^2 dx.$$

L'estimation (3.11), le choix de η et les propriétés de χ montrent que

$$|e^{\Psi^h, \eta/h} P_{h \vee -\lambda(h)}^h(h\vec{a}) w^h|^2 \leq C h^{-3} e^{2(\Psi^h, \eta - \Psi^h)/h} h^6 (1 + s^h)^2 \leq C h^{5+2\eta_1^{-1}} r^{-4-2\eta_1^{-1}}.$$

On en déduit alors que

$$\int_{|x| \geq hc} |e^{\Psi^h, \eta/h} P_{h \vee -\lambda(h)}^h(h\vec{a}) w^h|^2 dx \leq C h^{5+2\eta_1^{-1}} \int_{hc}^{\rho_1} r^{-2-2\eta_1^{-1}} dr \leq C h^4.$$

Compte tenu de (3.12), on obtient que

$$\|e^{\Psi^h, \eta/h} P_{h \vee -\lambda(h)}^h(h\vec{a})(u^h - w^h)\| \leq C h^2;$$

cette dernière estimation, celle (3.6) avec $\varphi^h = \Psi^h, \eta$ et (3.13) montrent que

$$h \|D(e^{\Psi^h, \eta/h}(u^h - w^h))\|^2 + \|e^{\Psi^h, \eta/h}(u^h - w^h)\|^2 \leq C h^2.$$

Comme

$$\|u^h - w^h\|_{L^2(\Sigma)}^2 \leq C h^{-2E_0-2\eta_1^{-1}} e^{-2\rho_0/h} \|e^{\Psi^h, \eta/h}(u^h - w^h)\|_{L^2(\Sigma)}^2,$$

on en déduit le lemme en utilisant l'inégalité

$$\|v\|_{L^2(\Sigma)}^2 \leq \|v\| \times \|Dv\|, \quad \forall v \in H^1(\Omega) \quad \blacksquare$$

Remarquons que l'on a

$$(3.14) \quad \|\chi u_0\|_{L^2(\Sigma)}^2 + \|\chi u_1\|_{L^2(\Sigma)}^2 \leq C h^{-2E_0} e^{-2\rho_0/h}.$$

Cas du double puits. — On suppose ici que

$$(3.15) \quad V(x) = \frac{c_1(x)}{|x - M_0|} + \frac{c_2(x)}{|x + M_0|} + c_0(x),$$

avec $M_0 \in \mathbb{R}^3$. On suppose que les c_j et les a_j sont dans $C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ et que

$$(3.16) \quad V(x) \rightarrow 0, \quad \text{quand } |x| \rightarrow \infty.$$

Soit $\vec{n} := M_0/|M_0|$ et soit Σ le plan normal à \vec{n} et passant par $\{0\}$. On suppose que (2.46) et (2.49) sont vérifiées et que

$$(3.17) \quad \nabla c_1(M_0) = \vec{0} \quad \text{et que} \quad 0 < \tau < \frac{1}{2} \quad (\tau = -c_1(M_0)).$$

Soient \mathcal{O}_1 et \mathcal{O}_2 deux ouverts réguliers, bornés, symétriques par rapport à Σ et vérifiant: $M_0 \in \mathcal{O}_1, M_0 \notin \mathcal{O}_2$ et $\mathcal{O}_1 \cap \mathcal{O}_2 \neq \emptyset$. Les $P_{h \vee}^{h, \mathcal{O}_i}(h\vec{a})$ sont unitairement équivalents, (2.51) est encore vérifié.

Soit $(E_j(h))_{j \geq 1}$ la suite croissante des valeurs propres ≥ 0 de $P_{h \vee}^h(h\vec{a})$.

THÉORÈME 3.7. — *Sous les hypothèses ci-dessus, on a les propriétés suivantes. Si le champ magnétique ne s'annule pas en M_0 , alors les 4 premières valeurs propres de $P_{h \vee}^h(h\vec{a})$ sont simples. Il existe δ_0, δ_1 et $\delta_2 > 0$, tels que l'on ait quand $h \rightarrow 0$,*

$$E_{2i}(h) - E_{2i-1}(h) = \delta_i h^{1-2\lambda} e^{-2\tau/h} (1 + \mathcal{O}(h));$$

ceci pour $i=1, 2$, et

$$E_3(h) - E_2(h) = \delta_0 h^2 (1 + \mathcal{O}(h)).$$

S'il n'y a pas de champ magnétique, i.e. $\vec{a} \equiv \vec{0}$, alors on a, quand $h \rightarrow 0$,

$$E_{2i}(h) = E_{2i-1}(h) \quad \text{pour } i=1, 2.$$

et il existe $\delta > 0$ tel que

$$E_3(h) - E_2(h) = \delta h^{1-2\lambda} e^{-2\tau\rho/h} (1 + \mathcal{O}(h)).$$

$$(\lambda = (1 - \tau^2)^{1/2} \text{ et } \rho = |\mathbf{M}_0|).$$

La démonstration est identique à celle du théorème 2.9 en utilisant (3.13) et (3.13') pour approximer (2.41).

Le théorème 3.7 s'applique à l'hydrogène ionisé sans champ magnétique où avec un champ constant $\vec{\mathbf{B}}$ orthogonal à l'axe des deux noyaux :

$$V(x) = -\tau/|x - \mathbf{M}_0| - \tau/|x + \mathbf{M}_0|, \quad \vec{a}(x) = \vec{\mathbf{B}} \times x \quad \text{et} \quad \vec{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{M}_0 = 0.$$

RÉFÉRENCES

- [BE-GE] A. BERTHIER, V. GEORGESCU, On the Point Spectrum of Dirac Operators, *J. Funct. An.*, vol. **71**, 1987, p. 309-338.
- [BE-SA] A. BERTHE, E. E. SALPETER, Quantum Mechanics of one and two electron atoms, Plenum Publishing Corporation, New York, 1977.
- [CHA] K. CHANTELAU, Coulombic Potentials in the Semi-Classical Limit, *Lett. Math. Phys.*, vol. **19**, 1990, p. 285-290.
- [HA-KL] E. M. HARRELL, M. KLAUS, On the double-well problem for Dirac operators, *Ann. Inst. Henri Poincaré, Phys. Théor.*, vol. **38**, (2), 1983, p. 153-166.
- [HEL] B. HELFFER, Semi-Classical Analysis for the Schrödinger Operator and Applications, *Lect. Notes Math.*, 1336, Springer-Verlag, 1988.
- [HE-NO-WA] B. HELFFER, J. NOURRIGAT, X. P. WANG, Sur le spectre de l'équation de Dirac avec champ magnétique, *Ann. Sci. École Norm. Sup.*, série 4, vol. **22**, (4), 1989, p. 515-533.
- [HE-SJ] B. HELFFER, J. SJÖSTRAND, [1] Multiple Wells in the Semi-Classical Limit I, *Comm. Part. Diff. Eq.*, vol. **9**, (4), 1984, p. 337-408. [2] Puits multiples en limite semi-classique II. Symétries. Perturbation, *Ann. Inst. Henri Poincaré, Phys. Théor.*, vol. **42**, (2), 1985, p. 127-212. [3] Effet Tunnel pour l'Équation de Schrödinger avec Champ Magnétique, *An. Scuola Norm. Sup. Pisa*, série 4, vol. **14**, (4), 1987, p. 625-657. [4] Équation de Schrödinger avec champ magnétique et équation de Harper, *Lect. Notes*, 345, Springer-Verlag, 1989, p. 118-197.
- [HOR] L. HÖRMANDER, *The Analysis of Linear Partial Differential Operator III*, Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [KAT] T. KATO, *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer-Verlag, 1980.
- [MAR] A. MARTINEZ, [1] Estimation de l'effet tunnel pour le double puits, *J. Math. Pures Appl.*, vol. **86**, (2), 1987, p. 195-215. [2] Estimations de l'effet tunnel pour le double puits II. États hautement excités, *Bull. S.M.F.*, vol. **116**, (2), 1988, p. 199-229.
- [MA-RO] A. MARTINEZ, M. ROULEUX, Effet tunnel entre puits dégénérés, *Comm. Part. Diff. Eq.*, vol. **13**, (9), 1988, p. 1157-1187.

- [MOH] A. MOHAMED, Estimations Semi-classiques pour l'Opérateur de Schrödinger à Potentiel de type Coulombien et avec Champ Magnétique, *Asymptotic Analysis*, vol. 4, 1991, p. 235-255.
- [PAR] B. PARISSÉ, Résonances paires pour l'opérateur de Dirac, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. 310, (I), 1990, p. 265-268.
- [WAN] X. P. WANG, Puits multiples pour l'opérateur de Dirac, *Ann. Inst. Henri Poincaré, Phys. Théor.*, vol. 43, (3), 1985, p. 269-319.

(Manuscrit reçu le 30 novembre 1990.)