Construction BKW en fonds de puits, cas particuliers (Schrödinger, Dirac avec champ magnétique).

Bernard Parisse
Institut Fourier, Grenoble
parisse@fourier.ujf-grenoble.fr

January 24, 2001

Abstract

We study the spectral properties of pseudo-differential operators in the semi-classical limit at energies near a non degenerate minimum of the principal symbol p. We give precise asymptotics of the non resonant energy levels for a scalar holomorphic p, we get explicit expressions in dimension 2. Precise asymptotics are also derived for the Schrödinger and Dirac operator with electro-magnetic field in dimension 2 and 3 (and we give the transport equation of the first term of the WKB expansion of the associated eigenfunction). Then we study the Schrödinger and Dirac equation under rotational invariance hypothesis (in dimension 2), and prove that the holomorphic assumption of p can be replaced by C^∞ assumption on the fields. Moreover we prove that there is an associated effective Agmon distance and obtain decay properties of eigenfunctions similar to the case of Schrödinger or Dirac operator without magnetic field.

On étudie ici les propriétés spectrales d'opérateurs pseudo-différentiels en limite semi-classique pour des énergies voisines d'un minimum non dégénéré du symbole principal p. On donne des asymptotiques précises des niveaux d'énergie non résonants pour un p scalaire et holomorphe, ces asymptotiques sont explicites en dimension 2. On traite aussi le cas de l'opérateur de Schrödinger et de l'opérateur de Dirac avec champ électrique et magnétique en dimension 2 et 3 (on donnera dans ce cas l'équation de transport du premier terme du développement WKB de la fonction propre associée). Pour l'équation de Schrödinger ou Dirac en dimension 2, on montre aussi que sous des hypothèses d'invariance par rotation, on peut remplacer l'hypothèse d'analyticité de p par des hypothèses C^∞ sur les champs et on caractérise la décroissance des fonctions propres par une distance d'Agmon effective, comme en l'absence de champ magnétique.

Mot clefs: semi-classique, puits ponctuel non dégénéré, construction BKW, distance d'Agmon, Schrödinger, Dirac

Classification AMS: 35P20, 81Q05, 81Q20

1 Introduction

On s'intéresse ici en limite semi-classique aux propriétes spectrales d'opérateurs pseudodifférentiels dont le (déterminant du) symbole admet un minimum non dégénéré en un point de l'espace des phases pour des énergies proches de la valeur en ce minimum. Le cas de l'opérateur de Schrödinger et de l'opérateur de Dirac avec champ magnétique, en particulier dans le cas radial, seront étudiés plus en détails.

Dans le cas général, on s'intéresse à un opérateur scalaire P tel que:

$$P = \mathrm{Op}_W^h(p(x,\xi))$$

on suppose que p est au moins C^∞ (en général il faut supposer p holomorphe), admet un minimum non dégénéré E_0 en un point M_0 tel que $E_0 < \liminf_{x,\xi\to\infty} p$. On s'intéresse alors au spectre de P dans une zone $[E_0, E_0 + Ch]$ dans l'esprit de Helffer-Sjöstrand pour l'opérateur de Schrödinger ([3]). Martinez et Sordoni ([5]) décrivent ce spectre mais ils ne donnent pas une asymptotique explicite des valeurs propres/fonctions propres en fonction de p. La nouveauté de ce travail réside ici dans un calcul explicite des asymptotiques des valeurs propres et vecteurs propres en particulier en dimension 2 (théorème 1): il s'agit en fait de la généralisation de la méthode directe de [4] effectuée par Helffer et Sjöstrand pour l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique (on n'effectue pas de transformation de FBI). S'il y a plusieurs puits M_k correspondant à la même valeur de l'énergie E_0, on pourrait chercher à estimer la taille de l'effet tunnel dans l'esprit de [3] mais cela est beaucoup plus difficile (sauf si le champ magnétique est faible: cf. [4]) et la question est encore ouverte dans le cas général.

Les cas particuliers considérés seront l'équation de Schrödinger dans $\mathbb{R}^n$ avec potentiel électrique et magnétique:

$$P = \sum_{k=1}^{n} (\frac{h}{i}\partial_k - A_k(x))^2 + V(x)$$

on rappelle que le potentiel magnétique A est 1-forme différentielle:

$$A = \sum_{k=1}^{n} A_k(x) dx_k$$

et $B = dA$ est la 2-forme différentielle champ magnétique, où les A_k et V sont supposés holomorphes dans un voisinage des puits et C^∞ ailleurs et l'opérateur de Dirac dans $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$ et $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ pour $n = 2$ et $n = 3$ sous les mêmes hypothèses:

$$D_3(h) = \sum_{j=1}^{2} (\frac{h}{i}\partial_j - A_j)\sigma_j + \sigma_3 + V(x) I_2, \quad (1)$$

$$D_2(h) = \sum_{j=1}^{3} (\frac{h}{i}\partial_j - A_j)\alpha_j + \alpha_4 + V(x).I_4, \quad (2)$$

où les σ_j sont les matrices de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

et vérifient si (j, k, l) est dans l'ordre direct:

$$\sigma_j \sigma_k = i\sigma_l, j \neq k, \sigma_j^2 = I_2$$

et les α_k sont les matrices de Dirac:

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \ j = 1..3, \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}$$

qui vérifient:

$$\alpha_j\alpha_k = -\alpha_k\alpha_j, \ j \neq k, \quad \alpha_j^2 = I_4$$

Si l'on ne fait pas d'hypothèses supplémentaires sur les potentiels, on explicitera à la section 4 le calcul de l'asymptotique $O(h^\infty)$ des énergies et des fonctions propres au puits, en particulier pour les opérateurs de Schrödinger et Dirac (on montrera par exemple qu'en dimension 3 le spin 1/2 de la particule décrite par l'opérateur de Dirac interagit avec le champ magnétique et modifie l'asymptotique des valeurs propres: cf. l'équation (29)). Lorsque les potentiels possèdent la symétrie sphérique, l'hypothèse d'analyticité du potentiel n'est plus nécessaire et on montrera qu'on peut définir une distance d'Agmon effective avec des propriétés de décroissance des fonctions propres analogues à celle qu'on obtient pour l'opérateur de Schrödinger et Dirac sans champ magnétique: cf. le théorème 3. Malheureusement, cela réduit le champ d'étude à la dimension 2, et il n'est pas possible dans ce cas d'étudier l'effet tunnel puisque seule l'origine peut alors être un puits!

Outre les travaux de Helffer-Sjöstrand et Martinez, signalons quelques autres travaux sur des sujets connexes:

- dans [1], Helffer et Mohamed s'intéressent au cas de l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique lorsque le potentiel électrique est nul,
- dans [6], Matsumoto et Ueki effectuent des calculs explicites de généralisations de l'oscillateur harmonique et calculent le permier terme du développement en puissances de h de Schrödinger avec champ électrique et magnétique.
- dans [8], Nakamura étudie un cas particulier d'effet tunnel dans l'espace des phase (qui se ramène par transformation canonique à un modèle de type Schrödinger sans champ magnétique). Cf. [9] pour une étude plus générale inspirée des travaux de Martinez, et [10] pour une étude de décroissance des fonctions propres de l'opérateur de Schrödinger en dimension 2 et 3 avec champ magnétique constant.

2 Résolution près d'un puits.

On cherche à appliquer les méthodes de Helffer-Sjöstrand. La première étape consiste à montrer des inégalités "à poids" exponentiel $e^{-\phi/h}$, pour cela il faut d'abord savoir résoudre l'équation éiconale:

$$p(x, i\nabla\phi) = E_0 \quad \text{ou} \quad \frac{1}{2}(i\nabla\phi - A(x))^2 + V(x) = V_0 \tag{3}$$

au voisinage d'un puits M_k puis le long de "trajectoires" issues d'un voisinage d'un puits. Cette construction faite dans [4] est rappelée et illustrée par deux exemples où les calculs se simplifient dans la section 2.1. Dans cette section, on se place près d'un puits non dégénéré du potentiel M_k qu'on supposera être l'origine pour alléger les notations.

2.1 Cas de Schrödinger et Dirac.

Dans le cas de l'opérateur de Schrödinger, si on suppose que $\liminf_{|x|\to\infty} V(x) = V_\infty \in \mathbb{R}$, alors on montre que P est essentiellement auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^n)$. Supposons que $V(x)$ admette un minimum local $V_0 < V_\infty$ atteint aux point M_0,..., M_k:

$$V(M_k) = V_0, \quad V'(M_0) = 0, \quad W = V''(M_0) >> 0$$

On s'intéresse aux propriétés spectrales de P dans l'intervalle d'énergie $[V_0, V_0 + Ch]$ dans la limite semi-classique $h \to 0$. On notera aussi $\tilde{V}(x) = V(x) - V_0$.

Pour l'opérateur de Dirac en dimension 3, l'analogue des hypothèses faites ci-dessus est:

- $\liminf_{|x|\to\infty} V(x) = V_i \in \mathbb{R}$, $\limsup_{|x|\to\infty} V(x) = V_s \in \mathbb{R}$ sont tels que $V_s - V_i < 2$.
- Soit on suppose que V admet un minimum local non dégénéré V_0 tel que $V_s - 2 < V_0 < V_i$ et dans ce cas la région de spectre considérée sera $[V_0+1, V_0+1+Ch]$ (puits de particule)
- Soit on suppose que V admet un maximum local non dégénéré V_0 tel que $V_i + 2 > V_0 > V_s$ et la région de spectre considérée sera $[V_0 - 1 - Ch, V_0 - 1]$.

L'équation éiconale s'obtient ici en demandant que le noyau de

$$d(x, i\nabla\varphi) - (V_0 \pm 1).I_4 = \sum_{j=1}^{3} (i\partial_j \phi - A_j)\alpha_j + \alpha_4 + (V(x) - (V_0 \pm 1)).I_4$$

ne soit pas réduit au vecteur nul, donc que l'une de ces deux valeurs propres doubles soit nulle:

$$\pm\sqrt{1 + (i\nabla\phi - A)^2} + V(x) - (V_0 \pm 1) = 0$$

ce qui revient à

$$1 + (i\nabla\phi - A)^2 - (V(x) - (V_0 \pm 1))^2 = 0$$

qui est une équation du même type que (3). On laisse au lecteur le soin de vérifier que l'équation eiconale pour l'opérateur de Dirac en dimension 2 est du même type.

On considère les solutions complexes de l'évolution hamiltonienne de:

$$H(x, \xi) = \frac{1}{2}(\xi + iA)^2 - \tilde{V}(x)$$

C'est-à-dire qu'on résout:

$$\left\{ \begin{array}{lll} \frac{dx}{dt} & = & (\xi + iA(x)) \\ \frac{d\xi}{dt} & = & \nabla_x (V(x) - \frac{1}{2}(\xi + iA(x))^2) \end{array} \right. \qquad (S)$$

pour t paramètre réel mais x et ξ *complexes* (on utilise ici le fait que V et A sont holomorphes).

On va construire la variété stable à l'origine en suivant de très près Sjöstrand ([12]). L'idée est la suivante: Soit Ω_C un voisinage complexe de l'origine et ξ_0 la solution sortante du problème linéarisé en l'origine. À un instant $t > 0$, on regarde les solutions $(x(t), \xi(t)$ de (S) issues à l'instant $t = 0$ des points (x, ξ) avec $x \in \Omega_C$ et $\xi = \xi_0(x)$. On s'intéresse seulement aux solutions telles que $x(t)$ est resté dans Ω_C depuis l'instant $t = 0$. On définit alors la fonction $\xi_t(x)$ par $\xi_t(x) = \xi(t)$ si $x = x(t)$. Ensuite on montre que la famille ξ_t converge vers une fonction $\xi(x)$ lorsque t tend vers $+\infty$. Enfin on montre que la solution de (S) issue de $(x, \xi(x))$ à l'instant $t = 0$ converge vers le point fixe lorsque t tend vers $-\infty$.

2.1.1 Étude du linéarisé.

On se place dans une jauge telle que

$$A(x) = -B(0)x/2 + O(x^2)$$

où $B(0)$ désigne le champ magnétique à l'origine. À l'ordre 2, le hamiltonien vaut:

$$\frac{1}{2}(\xi - i\frac{B(0)}{2}x)^2 - \frac{1}{2}\ {}^t x V''(0) x$$

Comme $B(0)$ est antisymétrique:

$$\partial_{x_i}((B(0)x).\xi) = \partial_{x_i}(\sum_{j,k} B_{jk} x_k \xi_j) = \sum_j B_{ji}\xi_j = -(B(0)\xi)_i$$

Le linéarisé de (S) à l'origine est donc:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x \\ \xi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{iB(0)}{2} & I_n \\ V - \frac{B(0)^2}{4} & -\frac{iB(0)}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ \xi \end{pmatrix} \qquad (S0)$$

On montre aisément que λ est valeur propre de $(S0)$ si et seulement si:

$$\left(-V''(0) + i\lambda B(0) + \lambda^2\right)x = 0, \quad \xi = (\lambda + i\frac{B}{2})x \qquad (4)$$

Si on fait le produit scalaire hermitien de (4) avec x, on obtient:

$$-(x|V''(0)x) + \lambda(x|iB(0)x) + \lambda^2(x|x) = 0$$

Cette équation est à coefficients réels puisque $B(0)$ est antisymétrique et $V''(0)$ est symétrique. Son discriminant est:

$$(x|iB(0)x)^2 + 4(x|V''(0)x)(x|x)$$

donc est strictement positif car $V''(0)$ est définie positive. Les valeurs propres de $(S0)$ sont donc réelles et non nulles. En fait un calcul trivial montre que si (x,ξ) est vecteur propre de $(S0)$ associé à λ alors $(\overline{x}, -\overline{\xi})$ est vecteur propre associé à $-\lambda$. On va pouvoir suivre la preuve de Sjöstrand [12] point par point, en en modifiant juste les quelques détails qui diffèrent.

2.1.2 Construction de la variété stable.

On peut donc trouver des coordonnées analytiques complexes (x'', y'') sur Ω_C telles que le champ hamiltonien soit donné par:

$$H_q = Dx''\partial_{x''} - Dy''\partial_{y''} + O(||(x'', y'')||^2)(\partial_{x''}, \partial_{y''})$$

où D est une matrice diagonale à coefficients réels strictement positifs. Attention, ce système de coordonnées n'est pas hermitien, mais la norme $\sum |z_i|^2$ dans ce système de coordonnées est équivalente à la norme hermitienne. On restreint Ω_C à

$$\{(x'', y'')/||y''|| \leq ||x''|| \leq \delta\}$$

($\delta > 0$ assez petit) tel que l'évolution le long d'une courbe intégrale de H_q restant dans Ω_C vérifie:

$$(H_q + H_q*)(||x''||) > C||x''||, \quad (H_q + H_q*)(||y''||) < -C||y''|| \text{ si } ||y''|| = ||x''|| \qquad (5)$$

On en déduit que pour tout point $\rho \in \Omega_C$, $\Phi_t(\rho) = \exp tH_q(\rho)$ reste dans Ω_C pour $0 \leq t \leq T(\rho)$ et reste en dehors de Ω_C pour $T(\rho) \leq t \leq T(\rho) + \frac{1}{C}$ (avec la même constante C que dans (5), indépendente de ρ). L'évolution le long d'une trajectoire de H_q d'un vecteur tangeant est alors donnée par le système [12, (A.4)]:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \frac{d}{dt}\delta_{x''} & = & D\delta_{x''} + O((x'', y''))(\delta_{x''}, \delta_{y''}) \\ \frac{d}{dt}\delta_{y''} & = & -D\delta_{y''} + O((x'', y''))(\delta_{x''}, \delta_{y''}) \end{array} \right.$$

La région:

$$||\delta_{y''}|| \leq \varepsilon ||\delta_{x''}|| \qquad (6)$$

est donc stable le long d'une courbe intégrale de H_q de Ω_C lorsque le temps augmente.

Soit $\mathcal{T}_0$ le sous-ensemble de Ω_C d'équation $y'' = 0$, on définit pour $t > 0$ $\mathcal{T}_t = \Phi_t(\mathcal{T}_0) \cap \Omega_C$. L'équation (6) montre qu'on peut appliquer le théorème des fonctions implicites pour exprimer y'' en fonciton de x'' sur $\mathcal{T}_t$, il existe une fonction g_t, holomorphe, telle que $y'' = g_t(x'')$. Comme de plus g_t est borné par exemple par $||x''||$, par compacité, la suite g_t admet une sous-suite convergente $g_{t_j} \to g$ dans l'espace des fonctions holomorphes.

Soit ρ_t une courbe intégrale de H_q contenue dans Ω_C et $t_0 > 0$ fixé. Supposons que ρ_{t_0} ne soit pas dans $\mathcal{T}_{t_0}$, et montrons que ρ_t s'approche exponentiellement vite de $\mathcal{T}_t$. En effet, le segment γ_{t_0} réalisant le minimum de la distance de ρ_{t_0} à $\mathcal{T}_{t_0}$ est orthogonal à l'espace tangeant à $\mathcal{T}_{t_0}$ au point de croisement, sa composante $||x''||$ est donc négligeable devant sa composante $||y''||$ car les vecteurs de l'espace tangeant sont dans la zone vérifiant (6) (ceci ne dépend pas du fait que le système de coordonnées ne soit pas hermitien). Dans cette région le flot est contractant donc:

$$\frac{d}{dt}||\gamma_t|| \leq -C||\gamma_t||$$

A fortiori:

$$\frac{d}{dt}d(\rho_t, \mathcal{T}_t) \leq -Cd(\rho_t, \mathcal{T}_t).$$

En prenant $\rho_t = \Phi_{t+s}(x)$, on obtient:

$$||g_{t+s} - g_t|| \leq Ce^{-\frac{t}{C}}, \quad s \geq 0, t \geq 0$$

quitte à augmenter C. On en déduit que g_t converge vers g exponentiellement vite puis que

$$\frac{d}{dt}d(\rho_t, \mathcal{T}_+) \leq -Cd(\rho_t, \mathcal{T}_+), \quad \mathcal{T}_+ = \{(x'', g(x''))/x'' \in \Omega_C\}$$

et que $\mathcal{T}_+$ est la variété stable de H_q à l'origine.

Notons Y les coordonnées dans une base propre du linéarisé de (S), alors l'évolution d'un point de la variété stable est donné par:

$$\frac{dY}{dt} = \Lambda Y + O(Y^2)$$

où Λ désigne la matrice diagonale formée des valeurs propres réelles positives du système linéarisé. Si P désigne la matrice de passage de cette base propre, alors

$$X = PY \text{ donc } \frac{dX}{dt} = P\Lambda P^{-1}X + O(X^2) = (\nabla\phi + iA) \tag{7}$$

On en déduit aisément le premier terme du développement de Taylor de ϕ en 0: c'est la forme quadratique de matrice la partie symétrique de $P\Lambda P^{-1}/2$.

2.1.3 Projection sur le réel.

On sépare la partie réelle et la partie imaginaire de $\phi = \varphi + i\psi$ ce qui transforme (3) en:

$$(\nabla\varphi)^2 = 2\tilde{V} + |g|^2 \tag{8}$$
$$g = A + \nabla\psi \tag{9}$$
$$(g|\nabla\varphi) = 0 \tag{10}$$

On a vu à la section précédente qu'au voisinage d'un puits M_k, φ et g sont connus.

Remarque 1 *Le passage de A à g est un changement de jauge puisque $g = A + \nabla\psi$. On peut donc choisir un potentiel vecteur tel que la solution de l'équation éiconale soit réelle sur le réel, dans ce cas le champ de gradient de la solution (réelle) de l'équation éiconale est orthogonal au potentiel vecteur. Attention, la solution du système hamiltonien (S) reste complexe.*

On remarque que les équations (9) et (10) admettent une solution explicite lorsque φ est connue, donnée pour $x \neq 0$ par:

$$g = i(\nabla\varphi)\left[\int_{-\infty}^{0} \Phi_t^*(B)\ dt\right] \tag{11}$$

où $i(\nabla\varphi)$ désigne le produit intérieur du champ de vecteur $\nabla\varphi$ par la 2-forme différentielle $\int_{-\infty}^{0} \Phi_t^*(B)\ dt$ et où Φ_t désigne le flot de $\nabla\varphi$ à l'instant t (qui tend vers le point fixe M_k lorsque t tend vers $-\infty$).

En effet, comme d commute avec Φ_t^* et $dB = 0$, en appliquant la formule de Cartan, on obtient:

$$dg = \mathcal{L}_{\nabla\varphi} \left[\int_{-\infty}^{0} \Phi_t^*(B)\ dt \right]$$

où $\mathcal{L}$ désigne la dérivée de Lie. Donc $dg = B = dA$ et il existe ψ telle que $g = A + \nabla\psi$.

Réciproquement, si g est connu, φ est la solution d'une équation éiconale "classique" (la même que celle que l'on résout pour l'opérateur de Schrödinger sans champ magnétique).

En examinant (8), on s'apercoit que la décroissance exponentielle optimale que l'on peut espérer pour les fonctions propres en présence d'un champ magnétique devrait être plus grande qu'en absence de champ mangétique, puisqu'elle serait associée à une "distance d'Agmon" $V + |g|^2$ au lieu de V (mais il n'y a pas de concept de distance d'Agmon dans le cas magnétique général car le calcul de g nécessite la connaissance des trajectoires).

Remarque 2 *Une idée pour prolonger ϕ avec hypothèses C^∞:*
Étant donné un chemin γ de classe C^1 et une 1 forme différentielle $g(x_0)$ en son origine, on choisit un prolongement continu de $d\gamma$ à un voisinage de γ et on note Φ_t le flot associé, on définit alors la longueur du chemin γ par:

$$l(\gamma) = \int_\gamma (|g|^2 + 2V)|d\gamma|$$

où:

$$g(x) = g(x_0) + i(d\gamma(x)) \left[\int_{x_0}^{x} \Phi_t^*(B)\ d\gamma \right]$$

Pour prolonger φ, l'idée serait alors de minimiser $l(\gamma)$ sur l'espace des chemins. Mais la longueur l dépent du choix de Φ_t...

2.1.4 Le cas radial.

On suppose dans cette section que V et A sont invariants par rotation:

$$V(Rx) = V(x), \quad [R, A.\nabla] = 0 \text{ si } RR^t = I$$

Montrons d'abord qu'on peut choisir A non trivial uniquement en dimension 2. En effet en dimension 3 en utilisant les coordonnées sphériques, les rotations sont engendrées par exemple par ∂_φ et $\sin\varphi\partial_\theta + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\varphi\partial_\varphi$. On écrit la partie non radiale de $A.\nabla$ sous la forme $A^\varphi\partial_\varphi + A^\theta\partial_\theta$. En faisant commuter avec ∂_φ on obtient que A^φ et A^θ sont indépendants de φ. Puis en faisant commuter avec l'autre générateur on obtient que:

$$(\sin\varphi\partial_\theta A^\theta - \cos\varphi A^\varphi)\partial_\theta + (\sin\varphi\partial_\theta A^\varphi + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\varphi A^\varphi + \frac{1}{\sin^2\theta}\cos\varphi)\partial_\varphi = 0$$

donc $\sin\varphi\partial_\theta A^\theta - \cos\varphi A^\varphi = 0$ ce qui entraine $A^\varphi = 0$ et $A^\theta = C$ puisque A^φ et A^θ sont indépendantes de φ. La nullité du coefficient de ∂_φ permet alors de conclure que $A^\theta = 0$ donc que A est radial dont trivial puisqu'on peut annuler la partie radiale par changement de jauge.

On choisit une jauge telle que la partie radiale de A soit nulle, ce qui est possible puisque la partie radiale de A possède l'invariance par rotation et est donc le gradient d'un potentiel radial. La solution ϕ est alors également radiale dans une jauge adaptée car on a alors:

$$A\nabla\phi = 0$$

donc $\psi = 0$ et $g = A$ et ϕ est la solution d'une équation éïconale de type "classique" (sans champ magnétique mais avec un potentiel électrique effectif $V + A^2/2$). Autrement dit, si V et B sont invariants par rotation, il n'y a pas besoin d'hypothèse d'analyticité.

2.1.5 Quelques cas particuliers pour le linéarisé.

On suppose dans cette section que $M_k = 0$ pour simplifier les notations ce qui n'enlève rien à la généralité.

Si $B(0)$ commute avec $V''(0)$, alors les espaces propres E_k communs aux deux (associés aux valeurs propres v_k et ib_k) sont aussi espaces propres du linéarisé et (4) devient pour $x \in E_k$:

$$-v_k - \lambda_k b_k + \lambda_k^2 = 0, \quad \xi = (\lambda_k - \frac{b_k}{2})x$$

La valeur propre positive correspondante est:

$$\lambda_k = \frac{b_k + \sqrt{b_k^2 + 4v_k}}{2}$$

Notons ici que si ib_k non nul est valeur propre, alors $-ib_k$ l'est aussi et le sous-espace propre correspondant est sous-espace propre associé à v_k.

En dimension 2, on peut aussi donner des formules pour diagonaliser le linéarisé. On prend une base propre de V'', alors:

$$\begin{pmatrix} -v_1 + \lambda^2 & ib\lambda \\ -ib\lambda & -v_2 + \lambda^2 \end{pmatrix} x = 0$$

les valeurs propres s'obtiennent en résolvant l'équation bicarrée:

$$(-v_1 + \lambda^2)(-v_2 + \lambda^2) - b^2\lambda^2 = 0$$

soit, en posant $\mu = \lambda^2$:

$$\mu^2 - (b^2 + v_1 + v_2)\mu + v_1 v_2 = 0$$

Les deux valeurs propres positives sont donc:

$$\frac{\sqrt{v_1 + v_2 + b^2 \pm \sqrt{(b^2 + v_1 + v_2)^2 - 4v_1 v_2}}}{2} \tag{12}$$

2.2 Résolution de l'équation eiconale dans le cas d'un hamiltonien générique.

Soit $p(x, \xi)$ un hamiltonien, réel sur le réel, et qui admet un minimum (nul) non dégénéré en un point que l'on prendra comme origine. On cherche à résoudre l'équation éiconale:

$$q(x, \nabla\phi) = 0 \quad q(x, \xi) = -p(x, i\xi) \tag{13}$$

(On chosit cette convention pour que la partie réelle de ϕ représente la décroissance exponentielle).

A l'ordre 1, le champ hamiltonien est donné en 0 par:

$$H_q = \left(-i\frac{\partial^2 p}{\partial x \partial \xi} x + \frac{\partial^2 p}{\partial \xi^2}\xi\right)\frac{\partial}{\partial x} + \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} x + i\frac{\partial^2 p}{\partial \xi \partial x}\right)\frac{\partial}{\partial \xi} + O(x^2 + \xi^2)(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial \xi})$$

La matrice du linéarisé est donc de la forme:

$$M = \begin{pmatrix} -iA & B \\ C & iA^t \end{pmatrix}, \quad A = \partial_{x\xi}p, \ B = \partial_{\xi\xi}p, \ C = \partial_{xx}p \tag{14}$$

Comme B est définie positive, on peut poser $\Lambda = B^{-1/2}$:

$$\Lambda B \Lambda^t = I$$

On commence par conjuguer la matrice du linéarisé par la matrice:

$$N = \begin{pmatrix} B^{-1/2} & 0 \\ 0 & B^{1/2} \end{pmatrix}$$

ce qui donne:

$$\tilde{M} = NMN^{-1} = \begin{pmatrix} -i\tilde{A} & I \\ \tilde{C} & i\tilde{A}^t \end{pmatrix}, \quad \tilde{A} = B^{-1/2}AB^{1/2}, \tilde{C} = B^{1/2}CB^{1/2}$$

On est donc ramené au problème précédent mais avec $\tilde{B} = I$.

Notons au passage que la matrice $\tilde{C} - \tilde{A}^t\tilde{A}$ est définie positive: en effet, la matrice de la hessienne de p à l'origine est:

$$p'' = \begin{pmatrix} C & A^t \\ A & B \end{pmatrix},$$

on effectue le produit $\mathcal{D}p''\mathcal{D}^t$ où:

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} I & D \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad D = -A^tB^{-1}$$

ce qui annule les sous-matrices non diagonales et donne la matrice

$$\begin{pmatrix} C - A^tB^{-1}A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

qui est encore définie positive donc ses sous-matrices diagonales le sont aussi, donc $C - A^tB^{-1}A$ est définie positive donc:

$$\tilde{C} - \tilde{A}^t\tilde{A} = B^{1/2}(C - A^tB^{-1}A)B^{1/2} \tag{15}$$

est définie positive.

On peut alors conjuguer la matrice $\tilde{M}$ par

$$U = \begin{pmatrix} I & 0 \\ -iE\tilde{A}^t & E \end{pmatrix} \Rightarrow U^{-1} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ i\tilde{A}^t & E^{-1} \end{pmatrix}, \quad E = (\tilde{C} - \tilde{A}^t\tilde{A})^{-1/2}$$

Le conjugué de $\tilde{M}$ est alors une matrice hermitienne:

$$U\tilde{M}U^{-1} = \begin{pmatrix} -i\tilde{A} + i\tilde{A}^t & E^{-1} \\ E^{-1} & 0 \end{pmatrix} \tag{16}$$

qui est inversible. M est donc diagonalisable et ses valeurs propres sont réelles. Si on souhaite utiliser (16), rappelons que:

$$\tilde{A} = B^{-1/2}AB^{1/2},\ \tilde{C} = B^{1/2}CB^{1/2},\ E^{-1} = (\tilde{C} - \tilde{A}^t\tilde{A})^{1/2}, \tag{17}$$

$$A = \nabla_{x\xi}p,\ B = \nabla_{\xi\xi}p,\ C = \nabla_{xx}p \tag{18}$$

On vérifie encore que si (x, ξ) est vecteur propre de M correspondant à la valeur propre λ, alors $(\overline{x}, -\overline{\xi})$ est vecteur propre correspondant à $-\lambda$. On est donc dans la même situation qu'à la section précédente. D'où le:

Théorème 1 *Soit $p(x, \xi)$ un hamiltonien analytique dans un voisinage de $(0,0)$, réel sur le réel, et qui admet un minimum non dégénéré $p(0,0) = 0$ sur le réel. Alors l'équation éiconale $p(x, i\nabla\phi) = 0$ admet deux solutions analytiques dans un voisinage de $(0,0)$ données par les variétés stables et instable du hamiltonien H_q ($q(x,\xi) = -p(x, i\xi)$). La variété stable (respectivement instable) de H_q a pour espace tangeant à l'origine la somme des sous-espaces propres correspondants aux valeurs propres négatives (respectivement positives) de M définie à l'équation (14).*

Comme dans le cas de Schrödinger avec champ magnétique, il est possible d'écrire (4) sous la forme:

$$(\tilde{C} + (i\tilde{A}^t - \lambda)(i\tilde{A} + \lambda))x = 0$$

ce qui permet en dimension deux d'effectuer facilement le calcul formel des valeurs propres du linéarisé puisque ces λ annulent le déterminant de la matrice:

$$\begin{pmatrix} \lambda^2 - v_1 & ib\lambda \\ -ib\lambda & \lambda^2 - v_2 \end{pmatrix}$$

où on s'est placé dans la base propre de $\tilde{C}$, v_1 et v_2 désignent les valeurs propres de la matrice définie positive $\tilde{C} - \tilde{A}\tilde{A}^t$ (cf. (15)) et b est le coefficient supérieur droit de la matrice antisymétrique

$$\tilde{A} - \tilde{A}^t = B^{-1/2}(A - A^t)B^{1/2}$$

dans cette base. On continue alors comme à la section (2.1.5), les valeurs propres sont données par (12).

3 Prolongement de solutions de l'équation éiconale.

On peut bien entendu prolonger la variété stable issue d'un puits près de x réel tant qu'on dispose d'hypothèse d'analyticité de V et A (ou de p dans le cas d'un hamiltonien générique).

4 Construction BKW

La connaissance du spectre à l'ordre $O(h^\infty)$ ne nécessite que des informations locales près des puits. Elle se fait en deux temps: on montre d'abord que le spectre de l'opérateur P est en bijection avec celui de son approximation quadratique à l'origine, la bijection vérifiant $b(\mu) - \mu = O(h^{3/2})$, ceci est démontré dans [5, Proposition 3.3] sur le modèle de [3, Proposition 5.1, 5.2] si l'opérateur est scalaire, l'adaptation à l'opérateur de Dirac se fait comme dans Wang ([14]). Ensuite, on construit pour chaque valeur du spectre un quasi-mode d'ordre $O(h^\infty)$ dans les cas non-résonant. On montre aussi que le quasimode approche la vraie fonction propre à l'ordre $O(h^\infty)$ et même grâce aux hypothèses d'analyticité à $O(e^{-\varepsilon/h})$ pour un $\varepsilon > 0$ (cf. [5, Theorem 3.4])

4.1 Schrödinger avec champ magnétique.

Soit à résoudre:

$$\left(\frac{1}{2}\sum_j(\frac{h}{i}\partial_j - A_j(x))^2 + V(x) - hE(h)\right)(a(x,h)e^{-\phi(x)/h}) = O(h^\infty)e^{-\phi(x)/h}) \tag{19}$$

En regardant le terme d'ordre 0, on obtient que ϕ est la solution de l'équation éiconale, et (19) devient:

$$2h(\nabla\phi + iA).\nabla a + h(-2E(h) + \nabla.(\nabla\phi + iA))a - h^2\Delta a = O(h^\infty) \tag{20}$$

En écrivant un développement semi-classique de a et E en puissances croissantes de h, on peut résoudre (20): pour chaque puissance de h, l'équation qui détermine a_k est une équation de transport le long des courbes intégrales du système hamiltonien (S) dont le second membre dépend des a_j pour $j < k$. La résolubilité au puits équivaut à calculer la valeur de E_k. Par exemple pour $k = 0$, on détermine a_0 et E_0:

$$2\frac{da_0}{dt} + (-2E_0 + \nabla.(\nabla\phi + iA))a_0 = 0$$

Au puits, da_0/dt doit donc être équivalent à un multiple de a_0. Ce qui montre que a_0 est un monome du type αy^m ($m = (m_1, .., m_n)$ est un multiindice), et on détermine E_0 en fonction de m:

$$E_0 = \frac{1}{2}\nabla.(\nabla\phi + iA))(M_k) + \sum_{j=1}^{n}\lambda_j m_j$$

D'après (7), la divergence de $\nabla\phi + iA$ en 0 est la trace de $P^{-1}\Lambda P$, c'est donc la demi-somme des valeurs propres positives du linéarisé de (S), on en déduit que E_0 est un réel strictement positif, la plus petite valeur possible est d'ailleurs:

$$E_{0,0} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} \lambda_j$$

On peut faire le calcul analytique complet pour les cas de la section (2.1.5), on obtient par exemple en dimension 2:

$$E_{0,0} = \frac{\sqrt{w + \sqrt{w^2 - 4v_1v_2}}}{4} + \frac{\sqrt{w - \sqrt{w^2 - 4v_1v_2}}}{4}, \quad w = v_1 + v_2 + b^2$$

La seule partie non triviale par rapport à la résolution de l'équation analogue pour l'opérateur de Schrödinger sans champ magnétique est de montrer que l'on chosit des E_k tous réels. En l'absence de méthode directe évidente, on peut toujours montrer qu'un quasi-mode construit de cette manière avec des valeurs de E_k complexes est proche à $O(h^\infty)$ près d'une valeur propre ce qui entraine que les E_k sont réels.

4.2 Dirac avec champ magnétique en dimension 3.

On reprend ici les constructions faites dans [11] mais en rajoutant le potentiel vecteur (remarquons que cela ne permet de traiter que les cas où il n'y a pas de résonances entre les valeurs propres, ce qui est au moins vrai pour la première valeur propre). Pour simplifier les notations on suppose que $V_0 = 0$ est atteint en $x = 0$ quitte à changer la définition du potentiel électrique. On suppose aussi qu'on a effectué le changement de jauge tel que la solution de l'équation éiconale soit réelle (et donc de gradient orthogonal à A). Il s'agit alors de résoudre:

$$(\sum(\frac{h}{i}\partial_j - A_j)\alpha_j + \alpha_4 + (V(x) - hE(h)).I_4)(a(x,h)e^{-\frac{\varphi(x)}{h}}) = O(h^\infty)e^{-\frac{\varphi(x)}{h}} \tag{21}$$

où on cherche

$$a(x,h) \approx \sum_{n=0}^{\infty} a_n h^n \in \mathbb{C}^4 \text{ et } hE(h) \approx \sum_{n=1}^{\infty} h^n e_n \in \mathbb{R}.$$

On pose:

$$\begin{aligned}
Q &= \sum_{j=1}^{3} \frac{1}{i}\partial_j \alpha_j, &(22)\\
\varphi_j &= \partial_j \varphi, &(23)\\
\alpha_A &= \alpha_4 - \sum_{j=1}^{3} \alpha_j A_j, &(24)\\
P_{V,A} &= i\sum_{j=1}^{3} \alpha_j \varphi_j + \alpha_A + V(x).I_4 &(25)
\end{aligned}$$

A l'ordre $m = 0$ des puissances de h, on obtient que $P_{V,A}a_0 = 0$ qui admet des solutions non triviales car d'après l'équation éiconale, 0 est valeur propre (double) de $P_{V,A}$. Comme dans le cas sans champ magnétique, on décompose en tout $x \in \mathbb{R}^3$ l'espace $\mathbb{C}^4$ sous la forme:

$$\mathbb{C}^4 = \text{Ker } P_{V,A} \oplus (\text{Ker } P_{V,A})^\perp \quad a_n(x) = u_n(x) + v_n(x)$$

Dans cette décomposition, la puissance h^0 de (21) s'écrit $v_0 = 0$. L'équation complète s'écrit:

$$(P_{V,A} + hQ)\left(\sum_{n=0}^{\infty} u_n + v_n\right) = \left(\sum_{n=1}^{\infty} e_n h^n\right)\left(\sum_{n=0}^{\infty} u_n + v_n\right)$$

donc la puissance h^m s'écrit pour $m > 0$:

$$P_{V,A}v_m + Q(u_{m-1} + v_{m-1}) = \sum_{n=1}^{m} e_n(u_{m-n} + v_{m-n}) \tag{26}$$

Dans (26) les inconnues à déterminer sont v_m, u_{m-1} et e_m. Pour poursuivre les calculs, il faut effectuer quelques manipulations algébriques sur les matrices α:

Lemme 1

- $P_{V,A} + P^*_{-V,A} = 2\alpha_A = P_{-V,A} + P^*_{V,A}$.
- $\alpha_A^2 = (1 + A^2).I_4$. *Donc* α_A *est inversible, d'inverse* $(1 + A^2)^{-1}\alpha_A$.
- α_A *anticommute avec* $\sum_{j=1}^3 \alpha_j\varphi_j$ *(car deux* α_j *distincts anticommutent et* $\nabla\varphi$ *est orthogonal à* A*).*
- $P^*_{V,A}\alpha_A = \alpha_A P_{V,A}$ *(conséquence immédiate du résultat précédent)*
- $P_{V,A}P_{-V,A} = 0$ *(par l'équation éiconale)*
- *Ker* $P_{V,A}$ $=$ *Im* $P_{-V,A}$ *(d'après ce qui précède et pour des raisons de dimension).*
- *(Ker* $P_{V,A})^\perp =$ *Ker* $P^*_{-V,A}$.
- $$P_{-V,A}Q+QP_{V,A} = \sum_{j=1}^{3}\left[\frac{1}{i}\partial_j V\alpha_j + B_j\begin{pmatrix}\sigma_j & 0\\ 0 & \sigma_j\end{pmatrix}\right]+2\sum_{j=1}^{3}(\varphi_j+iA_j)\partial_j+\nabla.(\nabla\varphi+iA)$$

Comme $v_m \in \mathrm{Ker}\ P^*_{-V,A}$, on a $P_{V,A}v_m = 2\alpha_A v_m$. On peut donc calculer v_m dans (21):

$$v_m = \frac{1}{2(1+A^2)}\alpha_A\left[\sum_{n=1}^{m} e_n(u_{m-n} + v_{m-n}) - Q(u_{m-1} + v_{m-1})\right]$$

et se ramener en une équation sur les inconnues e_m et u_{m-1} en écrivant que $P^*_{-V,A}v_m = 0$ qu'on simplifie en commutant $P^*_{-V,A}$ avec α_A en:

$$P_{-V,A}\left[\sum_{n=1}^{m} e_n(u_{m-n} + v_{m-n}) - Q(u_{m-1} + v_{m-1})\right] = 0 \tag{27}$$

Pour $m = 1$, (27) s'écrit en utilisant la dernière identité du lemme:

$$\left[2Ve_1 + \sum_{j=1}^{3}\left[\frac{1}{i}\partial_j V\alpha_j + B_j\begin{pmatrix}\sigma_j & 0\\ 0 & \sigma_j\end{pmatrix}\right] + 2\sum_{j=1}^{3}(\varphi_j + iA_j)\partial_j + \nabla.(\nabla\varphi + iA)\right]u_0 = 0$$

En $x = 0$ si $u_0(x) \approx x^s u_0^0$ ($x^s = x_1^{s_1}x_2^{s_2}x_3^{s_3}$ dans des coordonnées adaptées au linéarisé du hamiltonien à l'origine), avec $u_0^0 \in \mathrm{Ker}\ P_{V(0),0}$ (donc les deux dernières composantes de u_0^0 sont nulles si $V(0) = -1$ ou les deux premières si $V(0) = 1$) on obtient:

$$\left[2V(0)e_1 + 2\sum_{j=1}^{3}\lambda_j s_j + \sum_{j=1}^{3}\lambda_j + \sum_{j=1}^{3}B(0)_j\begin{pmatrix}\sigma_j & 0\\ 0 & \sigma_j\end{pmatrix}\right]u_0^0 = 0 \tag{28}$$

où les λ_j sont les valeurs propres positives de (4). Si $B(0) \neq 0$, l'équation précédente admet deux couples (espaces de dimension 1,valeurs de e_1) solutions distinctes correspondant à:

$$e_1 = \sum_{j=1}^{3}(s_j + \frac{1}{2})\lambda_j \pm \frac{||B(0)||}{2} \tag{29}$$

On continue la résolution des puissances successives de h. Comme la matrice de (28) admet deux valeurs propres distinctes, on peut décomposer u_m^0 dans la base formée des deux vecteurs propres associés, le choix de e_m permet alors d'annuler la composante de u_m^0 correspondant au vecteur propre de valeur propre associée nulle, et comme l'autre valeur propre est non nulle on peut déterminer la seconde composante de u_m^0. Remarquons aussi que le choix des $u_m(x)$ au voisinage de 0 doit être fait en sorte que $u_m(x) \approx x^s u_m^0$, sinon on aurait la somme de deux fonctions BKW, la deuxième étant de norme $O(h^m)$ fois la première et ne correspondant pas à la même valeur propre ce qui est exclus. D'où le:

Théorème 2 *Si $B(0) \neq 0$ et s'il existe un unique triplet s tel que (29) alors la construction précédente permet de résoudre (21).*

Si $B(0) = 0$, alors la première puissance de h ne fixe pas la droite vectorielle à laquelle appartient u_0^0 et la recherche simultanée de u_m^0 et e_m n'est plus triviale car elle nécessite que e_m soit valeur propre d'un endomorphisme. Il faut alors peut être généraliser l'argument de commutation avec l'opérateur de Kramers qui permettait de conclure dans [11].

4.3 Dirac avec champ magnétique en dimension 2.

L'étude est très similaire à celle de la section précédente. On cherche $a(x,h) \in \mathbb{C}^2$ et $E(h)$ tels que:

$$\left(\sum (\frac{h}{i}\partial_j - A_j)\sigma_j + \sigma_3 + (V(x) - hE(h)).I_2 \right) (a(x,h)e^{-\frac{\varphi(x)}{h}}) = O(h^\infty)e^{-\frac{\varphi(x)}{h}} \tag{30}$$

On pose ici:

$$Q = \sum_{j=1}^{2} \frac{1}{i}\partial_j \sigma_j \tag{31}$$

$$\varphi_j = \partial_j \varphi, \tag{32}$$

$$\sigma_A = \sigma_3 - \sum_{j=1}^{2} \sigma_j A_j, \tag{33}$$

$$P_{V,A} = i\sum_{j=1}^{2} \sigma_j \varphi_j + \alpha_A + V(x).I_4 \tag{34}$$

on obtient ainsi (26) avec la décomposition de $\mathbb{C}^2$ en somme directe de Ker $P_{V,A}$ et de son orthogonal, chacun de dimension un ici. Le lemme 1 reste vrai en remplaçant les matrices α par les matrices σ et la dernière identité par:

$$P_{-V,A}Q + QP_{V,A} = \sum_{j=1}^{2} \sigma_j \frac{1}{i}\partial_j V + \sigma_3 B + 2\sum_{j=1}^{2}(\varphi_j + iA_j)\partial_j + \nabla.(\nabla\varphi + iA)$$

On poursuit l'étude de la section précédente, et on obtient l'équivalent de (28):

$$\left[2V(0)e_1 + 2\sum_{j=1}^{2} \lambda_j s_j + \sum_{j=1}^{2} \lambda_j + B(0)\sigma_3 \right] u_0^0 = 0 \tag{35}$$

avec u_0^0 ayant sa deuxième composante nulle si $V(0) = -1$ ou sa première composante nulle si $V(0) = 1$. Il n'est pas nécessaire de supposer que $B(0) \neq 0$ ici, l'effet du champ magnétique est de shifter de $\pm B(0)/2$ la valeur propre selon qu'il s'agit d'un puits de particule ou d'antiparticule et le théorème 2 reste vrai sans la restriction sur $B(0)$, mais contrairement à la dimension 3, le spin ne prend qu'une valeur pour chaque type de particule.

4.4 Cas d'un hamiltonien générique.

L'équation de transport s'obtient comme dans le cas d'une phase imaginaire pure, pour le terme de puissance h^1 on obtient ainsi:

$$\frac{1}{i}\nabla_\xi p(x,i\varphi').\nabla u_0 + \frac{1}{2i}(\sum_j \partial_j(\partial_{\xi_j} p(x,i\varphi')).u_0 - e_1 u_0 = 0$$

si p n'a pas de sous-principal, sinon il faut rajouter $p_{sub}u_0$, où on rappelle que si $p = p_0 + hp_1 + ...$:

$$p_{sub} = p_1 + \frac{1}{2i}\sum_j \frac{\partial^2 p_0}{\partial x_j \partial \xi_j}$$

5 Inégalités à poids.

Dans cette section, on cherche des estimations à priori sur la décroissance des fonctions propres de l'opérateur P quantifié de Weyl de p.

5.1 Schrödinger et Dirac avec champ magnétique.

Les estimations de décroissance pour ces deux opérateurs s'obtiennent à partir des égalités suivantes ([4, Théorème 1.1] pour Schrödinger et [7, (2.15)]): si Ω est un domaine borné de $\mathbb{R}^n$ ($n = 3$ pour Dirac) de frontière C^2, V un potentiel continu, φ une fonction lipschitzienne à valeur réelle et u une fonction C^2 s'annulant au bord de Ω alors:

$$\int_\Omega ||(\nabla+iA)(e^{\frac{\varphi}{h}}u)||^2\,dx + \int_\Omega (V-|\nabla\varphi|^2)e^{\frac{2\varphi}{h}}||u||^2\,dx = \Re\int_\Omega e^{\frac{2\varphi}{h}}(P_{A,V}u|u)\,dx \tag{36}$$

pour Schrödinger ($P_{A,V}$) alors que pour Dirac ($D_{A,V}$) on a:

$$\int_\Omega ||(\nabla.\alpha + iA.\alpha)(e^{\frac{\varphi}{h}}u)||^2\,dx + \int_\Omega (V-|\nabla\varphi|^2)e^{\frac{2\varphi}{h}}||u||^2\,dx \tag{37}$$

$$= \int_\Omega e^{\frac{2\varphi}{h}}(\Re(D_{A,V}u|D_{A,-V}u) - \Im(D_{A,V}u|\nabla\varphi.\alpha u)\,dx \tag{38}$$

où $\alpha = (\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$ en dimension 3 et $\alpha = (\sigma_1,\sigma_2)$ en dimension 2 désigne le vecteur formé par les matrices de Dirac.

5.1.1 Le cas radial.

On commence par montrer que les fonctions propres possédant aussi la symétrie sphérique décroissent effectivement comme si on n'avait pas de champ magnétique mais un potentiel électrique effectif, signalons qu'en dimension 2, ceci a été fait pour l'opérateur de Dirac par N. Suzuki ([13]). En dimension 2 pour Schrödinger, si u est une fonction radiale, le développement de la partie gradient des inégalités à poids donne:

$$||(\frac{h}{i}\nabla + A)(e^{\frac{\phi}{h}}u)||^2 = ||\frac{h}{i}\nabla(e^{\frac{\phi}{h}}u)||^2 + ||Ae^{\frac{\phi}{h}}u||^2$$

car A est orthogonal au gradient d'une fonction radiale.

Pour les fonctions non radiales il faut rajouter un terme d'erreur:

$$2h\Im\left(\int e^{\frac{2\phi}{h}}u(A.\nabla)u\right)$$

pour que l'égalité ci-dessus reste vraie. Soit u une fonction propre de l'opérateur de Schrödinger dont l'énergie est dans l'intervalle $[0, Ch]$. Alors la partie non radiale de la fonction propre u est bornée au sens où $\partial_\theta u = mu$ avec m borné par une borne dépendant de C mais indépendante de h, cela ne change pas les propriétés de décroissance puisque la dérivation dans la direction de A porte sur la partie θ, le terme d'erreur est donc d'ordre $Ch|u|^2$ et peut être absorbé dans le terme $\int e^{\frac{2\phi}{h}}(V-|\nabla\varphi|^2)|u|^2$. On peut faire le même raisonnement pour l'opérateur de Dirac.

D'où l'analogue de [3, Théorème 5.8]:

Théorème 3 *Soit $C>0$ fixé. Quitte à modifier légèrement C, on suppose que Ch n'est pas valeur propre de l'approximation quadratique de l'opérateur de Schrödinger (Dirac) avec champ magnétique. On suppose que V et A sont radials et C^∞. Il existe $h_0>0$ tel que pour $h<h_0$, K compact de $\mathbb{R}^2$, N entier, il existe une constante $C_{K,N}$ telle que:*
Si u est une fonction propre de l'opérateur de Schrödinger associé à une valeur propre de l'intervalle $[0,Ch]$ ($[-Ch,Ch]$ pour Dirac), alors il existe une approximation BKW u_{BKW} de u vérifiant:

$$||\nabla(e^{\frac{\varphi}{h}}(u-u_{BKW}))||_K+||e^{\frac{\varphi}{h}}(u-u_{BKW})||\leq C_{K,N}h^N$$

5.1.2 Le cas non radial.

Si on veut obtenir un résultat optimal pour l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique, il faudra que la phase ϕ tende vers la solution de l'équation éiconale. On verra à la section suivante 5.2 que la méthode générale nécessite l'étude de l'ellipiticité de l'opérateur de symbole:

$$(\xi+i\nabla\phi+A)^2+V(x),\quad (i\nabla\phi+A)^2+V(x)=0$$

Avec les notations de la section 2.1.3, cela revient à étudier l'ellipiticité du symbole

$$(\xi+g(x))^2-g(x)^2+2i\nabla\varphi.\xi$$

Or celui-ci s'annule à l'intersection d'un hyperplan orthogonal à $\nabla\varphi$ et d'une hypersphère centrée en $-g$ et de rayon $|g|$ (donc passant à par l'origine), le centre de cette sphère se trouve d'ailleurs dans l'hyperplan. Il est donc impossible de perturber cette phase de telle sorte que l'intersection soit loin de l'origine. Donc on ne peut pas obtenir de cette manière une information de décroissance exponentielle locale optimale.

On pourrait aussi essayer de généraliser la construction effectuée lorsque A et V sont radials. On effectue d'abord le changement de jauge tel que $A=g$, puis on cherche à estimer au mieux:

$$||(h\nabla-g)(e^{\frac{\varphi}{h}}u)||$$

On voit alors qu'il faudrait obtenir une estimation de:

$$h\int e^{\frac{2\varphi}{h}}u(g.\nabla)u\;dx$$

Pour conclure comme dans le cas radial, il faudrait pouvoir obtenir des estimations de contrôle *locales* de $(g.\nabla)u$ en fonction de u (si u a une forme BKW ces estimations viennent du fait que g est orthogonal à la phase, donc la dérivée directionnelle $g.\nabla$ porte sur le symbole de u et non sur la phase, ce qui permet de conserver la puissance h). Dans le cas radial, ces estimations étaient une conséquence du fait que u était également fonction propre du moment cinétique.

5.2 Le cas d'un hamiltonien générique.

On suppose dans cette section que le hamiltonien $p(x,\xi)$ est réel sur le réel, et analytique par rapport à la variable ξ dans une bande $|\Im\xi|<C$. Soit $\phi(x)$ une fonction C^∞ et telle que $|\nabla\phi|<C$. Alors:

$$P_\phi=e^{\frac{\phi}{h}}Pe^{-\frac{\phi}{h}},\quad P=\mathrm{Op}_h(p)$$

est un opérateur pseudo-différentiel de symbole principal $p_\phi = p(x, \xi + i\nabla\phi)$. En particulier si on se donne une fonction ϕ telle que p_ϕ soit uniformément elliptique, alors:

$$|u| \leq C|P_\phi u|$$

Soit en posant $u = e^{\phi/h} v$,

$$|e^{\frac{\phi}{h}} v| \leq C|e^{\frac{\phi}{h}} Pv| \tag{39}$$

Si on suppose que v est presque une fonction propre de P cette inégalité permet de contrôler $e^{\frac{\phi}{h}} v$ partout par la valeur de $e^{\frac{\phi}{h}} v$ dans la région où v n'est pas fonction propre de P.

Cette méthode permet par exemple de montrer que la décroissance des fonctions propres de l'opérateur de Klein-Gordon est régie par une distance d'Agmon (cf. [2]).

Remarque 3 *Il semble toutefois difficile d'obtenir des renseignements de décroissance locale optimales pour un hamiltonien général, il parait raisonnable dans ce cas de ne pouvoir obtenir que des renseignements microlocaux (cf. [5]).*

L'idée est plutot de multiplier la fonction propre par un poids exponentiel microlocal *adpaté. A. Martinez et V. Sordoni obtiennent ainsi de la décroissance exponentielle dans un voisinage microlocal du puits ([5, Thm 5.1]), remarquons que celle-ci donne de l'information de décroissance exponentielle locale non pas sur la fonction propre elle-même mais sur sa transformée par un opérateur intégral de Fourier associé à une transformation canonique linéaire qui change le hamiltonien à l'origine en:*

$$\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \mu_k (\xi^2 + x^2) + O(x^3, \xi^3)$$

Le problème de l'interaction entre puits dans le cas général (effet tunnel) est encore ouvert car on ne sait pas caractériser la décroissance des fonctions propres en-dehors de voisinage des puits.

References

[1] Bernard Helffer and Arbderemane Mohamed. Semiclassical analysis for the ground state energy of a Schroedinger operator with magnetic wells. *J. Funct. Anal.*, 138(1):40–81, 1996.

[2] B. Helffer and B. Parisse. Comparaison entre la décroissance de fonctions propres de l'opérateur de Dirac et de Klein-Gordon. Application à l'étude de l'effet tunnel. *Annales de l'Institut Henri Poincaré, Physique Théorique*, 60(2):147–187, 1994.

[3] B. Helffer and J. Sjöstrand. Multiple wells in the semi-classical limit-I. *Communication in Partial Differential Equation*, 9(4):337–408, 1984.

[4] Helffer, B. and Sjöstrand, J. . Effet tunnel pour l'equation de Schroedinger avec champ magnetique. (Tunnel effect for the Schroedinger equation with a magnetic field). *Ann. Sc. Norm. Super. Pisa, Cl. Sci., IV.*, 14(4):625–657, 1987.

[5] A. Martinez and V. Sordoni. Microlocal WKB expansions. *Journal of Funct. Analysis*, a paraitre.

[6] H. Matsumoto and N. Ueki. Spectral analysis of Schrödinger operators with magnetic fields. *Journal of Functional Analysis*, 140(1):218–255, 1996.

[7] A. Mohamed and B. Parisse. Approximation des valeurs propres de certaines perturbations singulières et application à l'opérateur de Dirac. *Annales de l'Institut Henri Poincaré, Physique Théorique*, 56(3):235–277, 1992.

[8] S. Nakamura. On an example of phase-space tunneling. *Annales IHP, Physique Théorique*, 63(2):211–229, 1995.

[9] S. Nakamura. On Martinez' Method of Phase Space Tunneling. *Rev. Maths. Phys.*, 7(3):431–441, 1995.

[10] S. Nakamura. Gaussian decay estimates for the eigenfunctions of magnetic Schroedinger operators. *Comm. PDE*, 21(5-6):993–1006, 1996.

[11] B. Parisse. Résonances pour l'opérateur de Dirac-II. *Helvetica Physica Acta*, 65:1077–1118, 1992.

[12] J. Sjöstrand. Analytic wavefront sets and operators with multiple characteristics. *Hokkaido Mathematical Journal*, XII(3):392–433, 1983.

[13] N. Suzuki. Semiclassical analysis of the dirac operator with magnetic fields. *Prepint*, 1998.

[14] Xue Ping Wang. Puits multiples pour l'opérateur de Dirac. *Annales de l'Institut Henri Poincaré-Physique Théorique*, 43(3):269–319, 1985.