

Équilibre instable en régime semi-classique - II: Conditions de Bohr-Sommerfeld.

Yves Colin de Verdière Bernard Parisse
ycolver@fourier.grenet.fr parisse@fourier.grenet.fr

Institut Fourier
URA 188 du CNRS
BP 74
38402 St Martin d'Hères Cedex

June 11, 1997

Abstract

Dans ce travail, nous étudions les valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger en dimension 1 qui sont proches d'un maximum local du potentiel. Il fait suite à [2] où nous étudions la concentration des fonctions propres associées. Nous montrons en particulier comment s'effectue la transition, dans le cas du double puits symétrique, entre les doublets de valeurs exponentiellement proches et les valeurs régulièrement espacées lorsque l'énergie augmente.

1 Introduction.

On considère l'opérateur de Schrödinger en dimension 1:

$$-\frac{h^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

où $V(x)$ est un potentiel admettant un maximum non dégénéré en $x = 0$:

$$V(0) = 0, \quad V'(0) = 0, \quad V''(0) < 0.$$

On s'intéressera plus particulièrement aux valeurs propres de cet opérateur au voisinage de $E = 0$ lorsque $h \rightarrow 0$ sous l'hypothèse:

$$\liminf_{|x| \rightarrow +\infty} V(x) > 0$$

ce qui assure que le spectre est discret dans un voisinage de 0.

Les premiers travaux consacrés à l'étude des valeurs propres près d'une valeur critique de l'énergie sont ceux de Ford-Hill-Wakeeno-Wheeler ([4]): ils étudient le problème de Dirichlet correspondant à $V(x) = -\frac{1}{2}x^2$ à l'aide de solutions explicites (fonctions spéciales). Dans les années 60, les physiciens ont réussi à étendre les conditions de quantification de Bohr-Sommerfeld à ce cas (Fröman [5], Connor [3]) mais sans préciser l'ordre en h de l'approximation obtenue. Elles ont la forme suivante:

$$\tan\left(\alpha - \frac{\pi}{2} - \frac{\phi}{2}\right) \tan\left(\beta - \frac{\pi}{2} - \frac{\phi}{2}\right) = \frac{e^{2\pi\varepsilon}}{(1 + \sqrt{1 + e^{2\pi\varepsilon}})^2},$$

où:

- $\phi = \varepsilon + \arg \Gamma(\frac{1}{2} - i\varepsilon) - \varepsilon \ln |\varepsilon|$ (Γ est la fonction gamma habituelle),
- $\varepsilon = \frac{E}{h\sqrt{-V''(0)}}$, où E est l'énergie,
- $h\alpha$ [respectivement $h\beta$] est l'aire du domaine $\{(x, \xi)/\frac{1}{2}\xi^2 + V(x) \leq E, x \geq 0$ [respectivement $x \leq 0\}$.

Si on compare avec la proposition 1 de ce travail, on peut conclure que cette équation est valide à $O(h)$ près.

Les mathématiciens se sont intéressés plus tardivement à ce problème:

- C. Gérard et A. Grigis ([6]) obtiennent une description du spectre lorsque V est analytique pour des valeurs de l'énergie E n'appartenant pas à la zone $[-Ch, Ch]$ (C étant une constante dépendant de V), ils utilisent des techniques de wronskien.
- On peut appliquer les résultats sur la fonction de comptage du nombre de valeurs propres près d'une valeur critique de Brumelhuys, Paul et Uribe ([1]) à ce problème, on obtient ainsi que le nombre de valeurs propres dans l'intervalle $[Ah, Bh]$ est équivalent à $\pi(B - A)|\ln h|$.
- J.Sjöstrand ([9]) donne une preuve des conditions de Bohr-Sommerfeld dans un cadre légèrement différent (les variétés lagrangiennes qu'il considère sont images de celles correspondant à notre problème par une rotation d'angle $\frac{\pi}{4}$ dans l'espace des phases, les indices de Maslov diffèrent donc). La technique qu'il utilise et que nous adopterons ici consiste à se ramener à un opérateur modèle via un théorème de forme normale (à l'origine, B. Helffer et J.Sjöstrand [7] avaient prouvé un théorème de forme normale pour ce type de singularité mais avec des hypothèses d'analyticité pour étudier le modèle de Harper).

Décrivons maintenant les résultats de ce travail:

1. On considère une famille de solutions (microlocales) de l'opérateur de Schrödinger sur un intervalle $[-b, b]$ contenant le point critique du potentiel. Pour $a \neq 0$, on peut représenter ces solutions près de $x = a$ comme

combinaisons linéaires de deux intégrales oscillantes (de phase nulle en $x = a$) et de même près de $x = -a$. Le théorème 2 énonce que pour a assez petit les 4 coefficients qui apparaissent dans ces 2 combinaisons linéaires vérifient deux relations linéaires dont on connaît le développement asymptotique en puissances de h , uniformément par rapport à E . On peut ainsi, connaissant microlocalement la solution près de $x = -a$, connaître la solution microlocalement près de $x = a$.

2. On considère un potentiel admettant un double puits. On décrit alors le spectre modulo $O(h^\infty)$ comme l'ensemble des solutions de l'équation (20) qui est, à $O(h)$ près, celle trouvée par Fröman et Connor.
3. On étudie enfin la forme du spectre en effectuant un zoom dans la zone d'énergie $[-Ch, Ch]$. La figure représente pour différents type de potentiels la zone de transition. En particulier, pour le double puits symétrique, lorsque $\frac{E}{h}$ tend vers 0, l'écart entre 2 valeurs propres successives est relativement à l'écart moyen alternativement $\frac{1}{2}$ et $\frac{3}{2}$.

2 Étude microlocale près du point critique.

Soit $V \in C^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ un potentiel tel que $V(0) = 0$, $V'(0) = 0$, $V''(0) < 0$ et soit $\psi_{h,E}$ une famille de solutions *réelles*, éventuellement au sens microlocal, de l'équation de Schrödinger sur l'intervalle $[-a, a]$:

$$\left(-\frac{1}{2}h^2\Delta + V(x)\right)\psi_{h,E} = E\psi_{h,E}, \quad (1)$$

indexée par h et E , l'ensemble des indices (h, E) admettant $(0, E_0)$ comme point d'accumulation (E_0 étant nul dans la plupart des cas).

Quitte à réduire a , V n'a pas d'autre point critique que 0. Donc près de $x = a$ [respectivement de $x = -a$], $\psi_{h,E}$ est microlocalement la somme de deux intégrales oscillantes associées au deux morceaux de variété lagrangienne:

$$\Lambda = \left\{\frac{1}{2}\xi^2 + V(x) = E\right\}.$$

Si on normalise les phases ϕ des quatre intégrales oscillantes qui apparaissent par $\phi = 0$ en $x = a$ et $x = -a$, alors le passage à la forme normale va permettre de donner deux relations entre les quatre coefficients des intégrales oscillantes, quitte à réduire encore a pour appliquer le théorème 12 de forme normale de [2].

On notera dans la suite $\psi_{\pm}^{in, out}$ (l'indice *in* ou *out* faisant référence à la direction du flot hamiltonien rapprochant ou éloignant une particule classique de $(0,0)$): cf. figure 1, p. 4) des solutions microlocales associées aux quatre morceaux de variétés lagrangiennes:

$$\Lambda_{\pm} = \left\{\frac{1}{2}\xi^2 + V(x) = E, \pm\xi > 0\right\}$$

normalisées de la façon suivante:

$$\overline{\psi_+^{out}}(x) = \psi_-^{in}(x), \quad \overline{\psi_+^{in}}(x) = \psi_-^{out}(x), \quad \psi_+^{out}(a) = \psi_-^{in}(a) \in \mathbb{R}, \quad \psi_+^{in}(-a) = \psi_-^{out}(-a) \in \mathbb{R}. \quad (2)$$

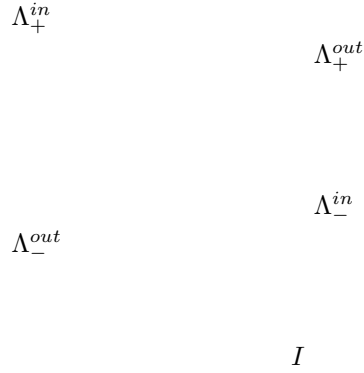


Figure 1: Les variétés $\Lambda_{\pm}^{in, out}$ et $\Lambda_{\pm}^{in, out}$.

Rappelons que l'espace vectoriel des microfonctions solutions microlocales de l'équation de Schrödinger au voisinage de $\Lambda_{\pm}^{in, out}$ est de dimension 1 (d'après le Lemme 18 de [2]). On a alors microlocalement près de $x = a$:

$$\psi_{h,E} = \lambda_+^{out} \psi_+^{out} + \lambda_-^{in} \psi_-^{in}. \quad (3)$$

et près de $x = -a$:

$$\psi_{h,E} = \lambda_+^{in} \psi_+^{in} + \lambda_-^{out} \psi_-^{out}, \quad (4)$$

avec, puisque ψ est supposée réelle,

$$\lambda_+^{out} = \overline{\lambda_-^{in}}, \lambda_+^{in} = \overline{\lambda_-^{out}}.$$

La normalisation (2) signifie que $\arg \lambda_{\pm}^{in, out}$ sont définis modulo π .

Le théorème de forme normale assure alors l'existence d'une fonction $f(E, h)$ telle que $f(0, 0) = 0$, $f'(0, 0) = \sqrt{-V''(0)}$, d'une transformation canonique τ définie dans un voisinage de $(x, \xi) = (0, 0)$ et d'un opérateur intégral de Fourier U associé à τ tels que:

$$U f(P, h) U^{-1} \sim_{[-b, b]^2} P_0 = \text{Op}^w(x, \xi), \quad (b > a)$$

donc $\phi_{E,h} = U\psi_{E,h}$ est solution microlocale de:

$$(P_0 - f(E, h))\phi_{E,h} = 0$$

dans un voisinage de $(x, \xi) = (0, 0)$.

Calculons maintenant les coefficients de $\phi_{E,h}$ dans la base des solutions distributions $\phi_{\pm}^{in, out}$ de P_0 normalisée comme dans [2]:

$$\phi_{\pm}^{out}(x) = Y(\pm x) \frac{1}{\sqrt{|x|}} e^{i\frac{E}{h} \ln |x|}, \quad \hat{\phi}_{\pm}^{in} = \overline{\psi_{\pm}^{out}}, \quad \text{où } Y(x) = 1 \text{ sur } \mathbb{R}^+ \text{ et } Y(x) = 0 \text{ sur } \mathbb{R}^-.$$

On observe que:

$$\mathcal{FC}\phi_{in}^{\pm} = \phi_{out}^{\pm}$$

où \mathcal{F} et \mathcal{C} désignent respectivement la transformation de Fourier et la conjugaison complexe, ce qui traduit la symétrie des variétés lagrangiennes par rapport à la deuxième bissectrice. De même, on passe des fonctions $\psi_{in, out}^{\pm}$ aux fonctions $\psi_{in, out}^{\mp}$ par conjugaison complexe. On va donc choisir un o.i.f. U qui respecte ces symétries de sorte que:

$$\overline{U^{-1}\phi_{in, \pm}} = U^{-1}\phi_{out, \mp}$$

(ce qui est possible, on commence par choisir une transformation canonique qui transforme la symétrie par rapport à la deuxième bissectrice en symétrie par rapport à l'axe des x , puis un symbole stable par conjugaison). Il existe donc des coefficients réels $\rho_d(E, h)$, $\rho_g(E, h)$ et des phases $\varphi_d(E, h)$ et $\varphi_g(E, h)$ (l'indice d ou g faisant référence au côté droit ou gauche de l'axe des ordonnées $O\xi$) telles que:

$$\psi_{+}^{out} = \rho_d(E, h)e^{i\varphi_d}U^{-1}\phi_{+}^{out}, \quad \psi_{+}^{in} = \rho_g(E, h)e^{i\varphi_g}U^{-1}\phi_{+}^{in},$$

de plus les phases admettent un développement asymptotique en puissances de h (de -1 à $+\infty$) à coefficients C^{∞} par rapport à E (voisin de 0) (on observe en effet qu'au voisinage de $x = a$ (ou de $x = -a$), les opérateurs de Fourier intégraux U permettant de passer des fonctions ψ aux fonctions ϕ se comportent bien lorsqu'on fait varier E dans un voisinage de 0 (éventuellement petit mais indépendant de h). On peut alors écrire les coordonnées de $\phi_{E,h}$:

$$\phi_{E,h} = \lambda_{+}^{in}\rho_g e^{i\varphi_g}\phi_{+}^{in} + \overline{\lambda_{+}^{in}}\rho_g e^{-i\varphi_g}\phi_{-}^{out} + \lambda_{+}^{out}\rho_d e^{i\varphi_d}\phi_{+}^{out} + \overline{\lambda_{+}^{out}}\rho_d e^{-i\varphi_d}\phi_{-}^{in}. \quad (5)$$

On applique maintenant les résultats du modèle P_0 , plus précisément, on sait d'après [2, équation (38)] que les coefficients de la décomposition (5) sont reliés par la matrice de transfert:

$$\begin{pmatrix} \lambda_{+}^{out}\rho_d e^{i\varphi_d} \\ \overline{\lambda_{+}^{in}}\rho_g e^{-i\varphi_g} \end{pmatrix} = T(\tilde{E}, h) \begin{pmatrix} \lambda_{+}^{in}\rho_g e^{i\varphi_g} \\ \lambda_{+}^{out}\rho_d e^{-i\varphi_d} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

où $\tilde{E} = f(E, h)$ et où la matrice T est unitaire et vérifie:

$$T(E) = \Phi\left(\frac{E}{h}\right) \begin{pmatrix} 1 & -ie^{-\frac{E}{h}\pi} \\ -ie^{-\frac{E}{h}\pi} & 1 \end{pmatrix} + O(h^{\infty}), \quad (7)$$

avec:

$$\Phi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Gamma\left(\frac{1}{2} - it\right) e^{\frac{\pi}{2}t} e^{-it \ln h} e^{i\frac{\pi}{4}}. \quad (8)$$

Remarquons que la formule de Stirling donne pour $|t| \rightarrow +\infty$:

$$\arg \Gamma\left(\frac{1}{2} - it\right) = t - t \ln |t| + o(1), \quad (9)$$

donc:

$$\arg \Phi(t) \sim_{|t| \rightarrow \infty} t - t \ln |t| - t \ln h + \frac{\pi}{4}. \quad (10)$$

alors que la formule des compléments donne:

$$|\Phi(t)| = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{-2t\pi}}}. \quad (11)$$

Posons:

$$\begin{cases} \tilde{\rho}_d &= |\lambda_+^{out}| \rho_d e^{i\tilde{\varphi}_d} & \tilde{\varphi}_d &= \varphi_d + \arg \lambda_+^{out} e^{i\tilde{\varphi}_g} \\ \tilde{\rho}_g &= |\lambda_+^{in}| \rho_g e^{i\tilde{\varphi}_g} & \tilde{\varphi}_g &= -(\varphi_g + \arg \lambda_+^{in}) \end{cases} \quad (12)$$

On a alors:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\rho}_d \\ \tilde{\rho}_g \end{pmatrix} = T(\tilde{E}, h) \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\tilde{\varphi}_g} \\ e^{-2i\tilde{\varphi}_d} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_d \\ \tilde{\rho}_g \end{pmatrix}, \quad (13)$$

donc 1 est valeur propre de la matrice:

$$\begin{aligned} N &\sim \Phi\left(\frac{\tilde{E}}{h}\right) \begin{pmatrix} 1 & -ie^{-\frac{E}{h}\pi} \\ -ie^{-\frac{E}{h}\pi} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\tilde{\varphi}_g} \\ e^{-2i\tilde{\varphi}_d} & 0 \end{pmatrix} \\ &\sim \Phi\left(\frac{\tilde{E}}{h}\right) \begin{pmatrix} -ie^{-t\pi - 2i\tilde{\varphi}_d} & e^{-2i\tilde{\varphi}_g} \\ e^{-2i\tilde{\varphi}_d} & -ie^{-t\pi - 2i\tilde{\varphi}_g} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

On applique alors le:

Lemme 1 Soit U une matrice unitaire:

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_2(\mathbb{C}), \quad U \neq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad U \neq \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_1} \\ e^{-i\theta_2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Alors 1 est valeur propre de U si et seulement si:

$$|a| \cos\left(\frac{\arg da}{2} - \arg a\right) = \cos\left(\frac{\arg da}{2}\right), \quad |d| = |a|.$$

(On vérifie aisément que le choix de la détermination de $\frac{1}{2} \arg da$ modulo π ne modifie pas cette équation.)

Pour la démonstration de ce lemme, on pourra se reporter à l'appendice A.

Comme $|a|(=|d|) = \frac{1}{\sqrt{1+e^{2t\pi}}} + O(h^\infty)$ est non nul et non égal à 1, on peut appliquer le lemme. De plus:

$$\frac{1}{2} \arg da = \arg \Phi - \frac{\pi}{2} - \tilde{\varphi}_d - \tilde{\varphi}_g, \quad \arg a = \arg \Phi - \frac{\pi}{2} - 2\tilde{\varphi}_d.$$

On obtient ainsi (quitte à modifier les angles $\varphi_{d,g}$ par un $O(h^\infty)$):

$$\cos \left(-\frac{\pi}{4} - t \ln h + \arg \Gamma\left(\frac{1}{2} - it\right) - \tilde{\varphi}_d - \tilde{\varphi}_g \right) = \frac{\cos(\tilde{\varphi}_d - \tilde{\varphi}_g)}{\sqrt{1 + e^{2t\pi}}} \quad (14)$$

On peut énoncer ce résultat sous la forme: p Soit $\psi_{h,E}$ une famille de solutions microlocales de l'équation de Schrödinger (1) à valeurs réelles sur l'intervalle $[-b, b]$. Pour un $a \in]0, b[$ convenablement choisi, $\psi_{h,E}$ s'exprime microlocalement comme combinaison linéaire des solutions microlocales $\psi_{\pm}^{in, out}$ de phases normalisées en $\pm a$ (cf. (2),(3) et (4)). Il existe alors des phases φ_d et φ_g admettant des développements asymptotiques en puissances de h (de -1 à $+\infty$) à coefficients C^∞ par rapport à E telles que:

$$\cos \left(-\frac{\pi}{4} - t \ln h + \arg \Gamma\left(\frac{1}{2} - it\right) + \varphi_g - \varphi_d + \arg \lambda_+^{in} - \arg \lambda_+^{out} \right) = \frac{\cos(\varphi_d + \varphi_g + \arg \lambda_+^{out} + \arg \lambda_+^{in})}{\sqrt{1 + e^{2t\pi}}}. \quad (15)$$

Remarquons que l'on peut modifier de façon arbitraire $\varphi_{d,g}$ sans modifier l'équation (15) (à $O(h^\infty)$ près), à condition que la matrice N conserve le même développement asymptotique.

Nous allons maintenant préciser les deux premiers termes du développement asymptotique des fonctions $\varphi_{d,g}$. Ainsi, à condition de connaître la solution près de $x = -a$ disons, c'est-à-dire de connaître λ_+^{in} , on pourra connaître la solution près de $x = a$: l'argument de λ_+^{out} vérifie l'équation (15) ce qui le détermine modulo π d'après l'appendice (le reste de l'information contenue dans λ_+^{out} est alors déterminé par (13), mais elle ne nous servira pas). Pour cela, nous allons comparer la formule (6) donnant $\arg \lambda_+^{out}$ en fonction de $\arg \lambda_+^{in}$ avec la formule "classique" connue lorsque $E \neq 0$ et $h \rightarrow 0$.

Si $E > 0$, on a d'après les résultats classiques:

$$\arg \lambda_{out,+} = \arg \lambda_{in,+} + \frac{A(E)}{2h} + O_E(h),$$

où $A(E)$ désigne l'aire comprise entre les verticales $x = \pm a$ et les deux morceaux de variétés lagrangiennes $\{\frac{1}{2}\xi^2 + V(x) = E\}$ (le reste $O_E(h)$ dépend de E). D'autre part (6) entraîne:

$$\arg \lambda_{out,+} = \arg \lambda_{in,+} + \arg \Phi\left(\frac{\tilde{E}}{h}\right) + \varphi_g - \varphi_d + O(h^\infty).$$

L'équivalent (10) donne alors:

$$\frac{A}{2h} + O_E(h) = t - t \ln |\tilde{E}| + \frac{\pi}{4} + \varphi_g - \varphi_d,$$

où $t = \frac{1}{h}f(E, h)$. On compare alors les puissances de h dans cette égalité, en posant:

$$\varphi_g - \varphi_d = \sum_{k=-1}^{\infty} \varphi_k(E)h^k, \quad f(E, h) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k(E)h^k,$$

donc pour la puissance -1 de h :

$$\frac{A(E)}{2} = f_0(E) - f_0(E) \ln |f_0(E)| + \varphi_{-1}(E) \quad (16)$$

en particulier (rappelons que φ_k est C^∞) $A(E)$ admet une singularité logarithmique à l'origine. On a ainsi déterminé $\varphi_{-1}(E)$ pour $E > 0$. Comme φ_{-1} est C^∞ , on connaît φ_{-1} pour $E \geq 0$. Pour la puissance 0 de h :

$$0 = f_1(E) - f_1(E) \ln f_0(E) - f_0(E) \frac{f_1(E)}{f_0(E)} + \frac{\pi}{4} + \varphi_0(E) \quad (17)$$

donc $f_1(E)$ est plat en $E = 0$ car φ_0 est C^∞ ; et $\varphi_0(E) = -\frac{\pi}{4}$.

Pour $E < 0$, on opère de manière identique. On a:

$$-\arg \lambda_{in,+} = \arg \lambda_{in,+} + \frac{A_g}{h} - \frac{\pi}{2} + O_E(h), \quad \arg \lambda_{out,+} = -\arg \lambda_{out,+} + \frac{A_d}{h} - \frac{\pi}{2} + O_E(h),$$

où A_d et A_g désignent respectivement l'aire comprise entre $x = 0$, $x = a$ et la variété lagrangienne ou entre $x = -a$, $x = 0$ et la variété lagrangienne ($-\frac{\pi}{2}$ est l'indice de Maslov). D'autre part (6) entraîne:

$$\begin{aligned} -\arg \lambda_{in,+} &= \arg \lambda_{in,+} + \arg \Phi\left(\frac{\tilde{E}}{h}\right) - \frac{\pi}{2} + 2\varphi_g + O(h^\infty), \\ \arg \lambda_{out,+} &= -\arg \lambda_{out,+} + \arg \Phi\left(\frac{\tilde{E}}{h}\right) - \frac{\pi}{2} - 2\varphi_d + O(h^\infty). \end{aligned}$$

Ce qui permet de déterminer $\varphi_d - \varphi_g$ (modulo π) pour $E < 0$. Les équations (16) et (17) permettent alors de déterminer φ_{-1} et φ_0 pour E quelconque.

Par différence, on peut également extraire $\varphi_d + \varphi_g$ lorsque $E < 0$. On prolonge alors le résultat à $E = 0$. On choisit alors un prolongement C^∞ en $E = 0$ de cette fonction, que l'on note encore $\varphi_d + \varphi_g$. Par un argument de développement de Taylor en $E = 0$, la formule donnant $\varphi_d + \varphi_g$ à $E < Ch^\varepsilon$ pour $\varepsilon > 0$ est valable à une erreur d'ordre $O(h^\infty)$ près. Prenons $\varepsilon = \frac{1}{2}$. Alors, pour $E > C\sqrt{h}$, le choix du prolongement de $\varphi_d + \varphi_g$ ne modifie pas le développement asymptotique de la matrice N . L'équation (15) reste donc valide (quitte à modifier de façon $O(h^\infty)$ les phases $\varphi_{d,g}$) en prenant comme phase $\varphi_d + \varphi_g$ n'importe quel prolongement C^∞ de la fonction obtenue pour $E \geq 0$.

Finalement, dans (15), on a:

$$\varphi_g - \varphi_d = \frac{1}{h} \left(\frac{A(E)}{2} - f_0(E) + f_0(E) \ln f_0(E) \right) - \frac{\pi}{4} + O(h) \quad (18)$$

$$\varphi_g + \varphi_d = \frac{A_g - A_d}{2h} + O(h) \quad (19)$$

3 Conditions de Bohr-Sommerfeld pour le problème du double puits.

Nous allons appliquer (15) au cas d'un potentiel admettant un double puits (par exemple $V(x) = x^4 - x^2$ ou $V(x) = x^4 - x^3 - x^2$).

On suppose donc que la surface d'énergie E :

$$\Omega_E = \{(x, \xi) \in T^*\mathbb{R}/\frac{1}{2}\xi^2 + V(x) = E\}$$

possède deux composantes connexes pour $E < 0$ et une seule composante connexe pour $E > 0$. Enfin, on suppose que

$$V^{-1}(0) = \{x_-, 0, x_+\}$$

avec $x_- < 0$ et $V'(x_-) < 0$ et $x_+ > 0$ et $V'(x_+) > 0$.

Nous avons donc deux relations supplémentaires entre les 4 coefficients $\lambda_{\pm}^{in, out}$, qui sont de la forme:

$$\lambda_-^{in} = e^{i\theta_d} \lambda_+^{out}, \quad \lambda_+^{in} = e^{i\theta_g} \lambda_-^{out},$$

où les angles $\theta_{d,g}$ admettent des développements semi-classiques en puissances de h dont le début est donné par:

$$\theta_d = \frac{a_d(E)}{h} - \frac{\pi}{2} + O(h), \quad \theta_g = \frac{a_g(E)}{h} - \frac{\pi}{2} + O(h).$$

Ici a_d [respectivement a_g] désigne l'aire du domaine $\Omega_E \cap \{x \geq a\}$ [respectivement $\Omega_E \cap \{x \leq -a\}$] où $\Omega_E = \{(x, \xi) / V(x) + \frac{1}{2}\xi^2 \leq E\}$.

Donc:

$$\arg \lambda_+^{in} = \frac{1}{2}\theta_g \quad (\pi) = \frac{a_d(E)}{2h} - \frac{\pi}{4} + O(h), \quad \arg \lambda_+^{out} = -\frac{1}{2}\theta_d \quad (\pi) = -\frac{a_g(E)}{2h} + \frac{\pi}{4} + O(h),$$

en particulier $\arg \lambda_+^{in, out}$ admet un *DAS* (développement asymptotique) en puissances de h à coefficients C^∞ par rapport à E .

On applique alors (15) et on obtient la:

Proposition 1 *Soit V un potentiel C^∞ admettant un maximum non dégénéré en $x = 0$. Il existe alors $E_0 > 0$ et $h_0 > 0$ tels que, pour $E \in [-E_0, E_0]$ et $0 < h \leq h_0$, l'équation de Schrödinger:*

$$\left(-\frac{1}{2}h^2\Delta + V(x)\right)\psi_{h,E} = E\psi_{h,E}$$

admette une famille de solutions microlocales $\psi_{h,E}$ si et seulement si E est (à $O(h^\infty)$ près) solution de:

$$\cos\left(-\pi + \arg \Gamma\left(\frac{1}{2} - it\right) - t + t \ln |t| + \alpha\right) = \frac{\cos \beta}{\sqrt{1 + e^{2t\pi}}}, \quad (20)$$

où on rappelle que:

- $\tilde{E} = f(E, h)$, $t = \frac{\tilde{E}}{h}$, $f(0, 0) = 0$, $f'(0, 0) = (-V''(0))^{-1/2}$, f admet un DAS en puissances de h à coefficients C^∞ en fonction de E .
- $2h\alpha$ est, à un $O_E(h)$ près, l'aire \mathcal{A} de $\Omega_E = \{(x, \xi)/\frac{1}{2}\xi^2 + V(x) \leq E\}$, plus précisément:

$$\alpha = \frac{\mathcal{A}}{2h} + \frac{f_0(E) \ln |f_0(E)| - f(E, h) \ln |f(E, h)|}{h} + O(h),$$

où $O(h)$ admet un DAS en puissances de h à coefficients C^∞ en fonction de E ,

- $2h\beta$ est, à un $O(h)$ près, la différence $\Delta\mathcal{A}$ entre les aires \mathcal{A}_d de $\Omega_E \cap \{x \geq 0\}$ et \mathcal{A}_g de $\Omega_E \cap \{x \leq 0\}$ pour $E \leq 0$ et un prolongement C^∞ pour $E > 0$.

Pour passer à l'étude du spectre, il suffit de grouper les valeurs propres en paquets de tailles $O(h^\infty)$ séparés par des trous de taille supérieure à $O(h^N)$. Dans chaque paquet, on peut alors construire une bijection entre le spectre et les solutions de (20) correspondant à des quasimodes linéairement indépendants (c'est-à-dire qu'on caractérise une solution par son vecteur (x_+^{out}, x_-^{out}) et que l'on prend une famille libre¹ maximale de tels vecteurs: ici une telle famille possède 1 ou 2 éléments). En effet, si le paquet est constitué d'1 seule valeur propre, l'existence de la bijection est immédiate. S'il est constitué de N valeurs propres, on en déduit plusieurs solutions microlocales orthogonales de l'équation de Schrödinger donc plusieurs couples (x_+^{out}, x_-^{out}) orthogonaux donc $N = 2$ et réciproquement si on construit 2 quasimodes indépendants, on a alors 2 vecteurs propres indépendants correspondant à l'énergie E .

Autrement dit, l'équation (20) généralise les conditions de Bohr-Sommerfeld. La méthode qui a permis de déterminer les développements asymptotiques de ϕ_d et ϕ_g nous assure que, lorsque $t \rightarrow \pm\infty$, on doit retrouver les conditions de Bohr-Sommerfeld habituelles. En effet, si on applique la formule de Stirling à la fonction Γ pour $t \rightarrow \pm\infty$:

$$\arg \Gamma\left(\frac{1}{2} - it\right) = t - t \ln |t| + o(1)$$

on en tire (à $O(h)$ près):

- si $E > 0$ ($t \rightarrow +\infty$),

$$\pi + \frac{\mathcal{A}(E)}{2h} = \frac{\pi}{2}(2k + 1), \quad k \text{ entier}$$

i.e. $\mathcal{A}(E) = h\pi(2k + 1)$.

- si $E < 0$ ($t \rightarrow -\infty$), (on rappelle que $\Delta\mathcal{A}$ désigne la différence des aires),

$$\pi + \frac{\mathcal{A}(E)}{2h} = \pm \frac{\Delta\mathcal{A}(E)}{2h} + 2k\pi$$

i.e. $\mathcal{A}_g(E) = h\pi(2k + 1)$ ou $\mathcal{A}_d(E) = h\pi(2k + 1)$.

¹Microlocalement libre, c'est-à-dire telle que le déterminant de la famille ne soit pas $O(h^\infty)$

Remarque 1 *Le nombre de valeurs propres dans l'intervalle $[Ah, Bh]$ est équivalent à $\pi(B-A)|\ln h|$ (généralisation de la formule de Weyl, cet équivalent a été démontré dans un cas plus général par Brummelhuis-Paul-Urbe: cf. [1], nous verrons que l'on peut déduire cet équivalent de l'équation (15)). Lorsque h tend vers 0, il y a donc de plus en plus de valeurs propres $E(h)$ dont le paramètre $t = \frac{\tilde{E}}{h}$ tend vers une limite donnée.*

4 Forme du spectre.

Nous allons maintenant nous intéresser à la zone d'énergie $E \in [-Ch, Ch]$, afin, entre autres, d'étudier dans le cas du double puits symétrique la transition entre le phénomène d'effet tunnel qui apparaît pour $E < -\varepsilon_0 < 0$ (les valeurs propres sont alors groupées en doublets de taille exponentiellement petite par rapport à h) et la zone $E > \varepsilon_0 > 0$ où l'écart entre deux valeurs propres consécutives est d'ordre h (il n'y a plus de doublets).

On suppose que les conditions de recollement des solutions microlocales à l'extérieur de l'intervalle $[-a, a]$ permettent:

- de connaître $\arg \lambda_+^{in, out}$ en fonction de E et h ,
- d'affirmer que ces fonctions admettent un *DAS* en puissances de h à coefficients C^∞ en fonction de E (proche de 0).

Ce qui est le cas lorsque le potentiel vérifie $\liminf V > 0$ et que 0 n'est pas valeur critique de V ailleurs qu'en $x = 0$.

On écrit alors (15) sous la forme:

$$\cos f_h(t) = \frac{\cos \frac{b(th, h)}{h}}{\sqrt{1 + e^{2t\pi}}}, \quad f_h(t) = \left(-t \ln h + \frac{a(th, h)}{h} \right) \quad (21)$$

où a et b sont des fonctions admettant des *DAS* en puissances de h à coefficients C^∞ par rapport à th .

Essayons maintenant de donner un sens quantitatif à la forme du spectre. Nous proposons d'étudier le rapport entre deux trous successifs dans le spectre (ce qui est l'analogie de l'étude faite par März pour l'équation de Hill entre la taille des bandes et des gaps du spectre: cf. [8]). Si on note λ_n la suite ordonnée des valeurs propres, on pose:

$$r_n = \frac{\lambda_{n+2} - \lambda_{n+1}}{\lambda_{n+1} - \lambda_n}.$$

Remarquons que pour le double puits symétrique, lorsque $E < 0$, r_n est alternativement exponentiellement petit et exponentiellement grand. Plutôt que d'étudier r_n , on va s'intéresser au *paramètre de forme du spectre*:

$$R_n = \inf(r_n, r_n^{-1}).$$

Le cas classique du double puits donne alors:

- pour $E < 0$, $R_n = O(h^{-N} e^{-\frac{C(E)}{h}})$ où $C(E)$ désigne la distance d'Agmon entre les deux puits,
- pour $E > 0$, $R_n \rightarrow 1$.

Pour h tendant vers 0, nous avons vu précédemment que de nombreuses valeurs propres ont leur paramètre $\frac{1}{h}\tilde{E}$ qui tendent vers la même limite t . Pour ces valeurs propres, on peut calculer un équivalent de R_n en fonction de t :

$$\frac{1}{R} \underset{h \rightarrow 0}{\sim} \frac{\pi}{\arccos\left(\frac{|\cos \beta|}{\sqrt{1+e^{2t\pi}}}\right)} - 1, \quad \beta = \frac{b(th, h)}{h} \quad (22)$$

ce qui permet de représenter la fonction R en fonction de $t = \frac{\tilde{E}}{h}$ (*cf.* figure 2, p. 12).

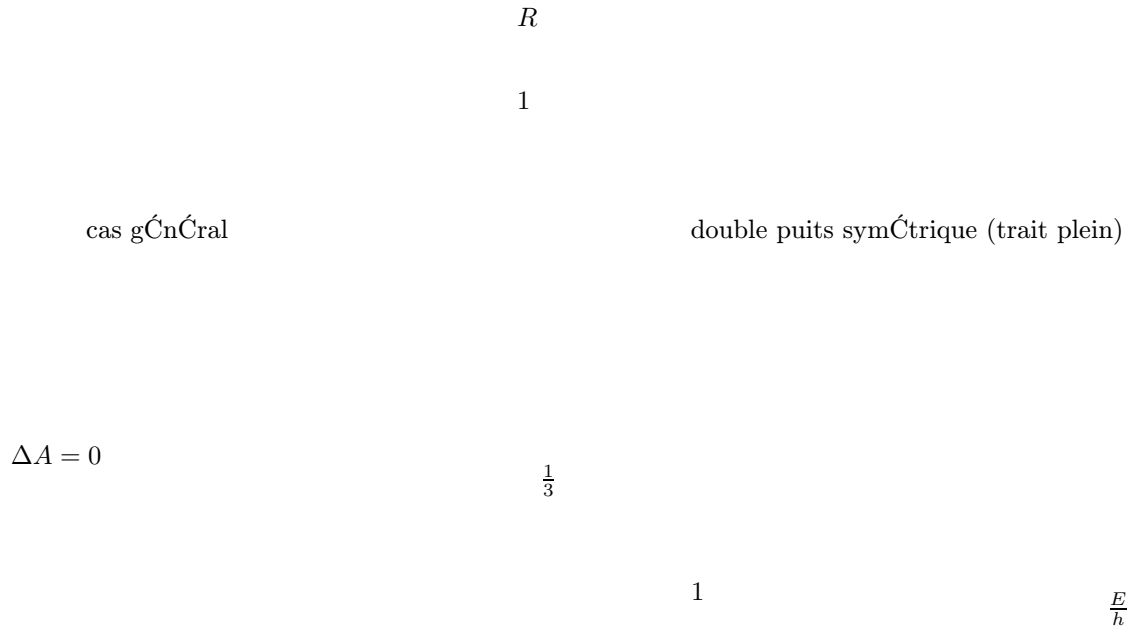


Figure 2: Paramètre de forme du spectre près de la valeur critique $E = 0$.

Commençons par donner une idée heuristique de la preuve de (22), avant de rentrer dans les détails techniques, essentiellement inspirés de l'étude analogue faite par Sjöstrand dans [9]. D'après (20), l'étude du paramètre de forme du spectre R_n se ramène à placer deux points sur une même verticale (*cf.* figure 3, p. 13), le premier point appartenant au cercle de rayon 1 et d'angle $f_h(t)$ et le second point appartenant au cercle de rayon $\frac{1}{\sqrt{1+e^{2t\pi}}}$ et d'angle β .

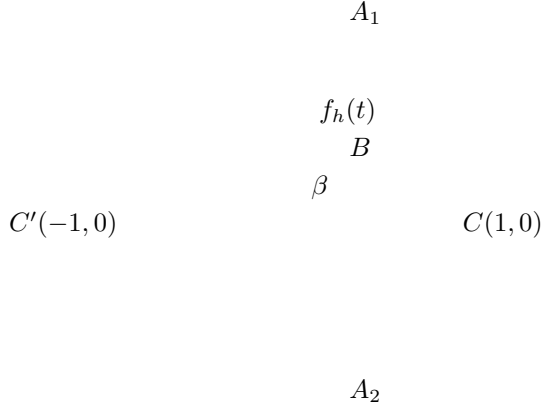


Figure 3: Le paramètre de forme vaut $\frac{A_1 B A_2}{A_1 C' A_2}$.

On compare alors la vitesse de variations des deux angles $F_h(t)$ et β :

$$\partial_t f_h(t) = |\ln h| + O(1), \quad \partial_t \beta = O(1)$$

autrement dit comme l'angle β varie très peu par rapport à l'angle $f_h(t)$ (pour h assez petit), on obtient 3 valeurs propres successives pour des angles $F_h(t)$ correspondant aux points A_1 , A_2 et à nouveau A_1 du cercle de rayon 1. Le rapport R est donc égal, à $O(\frac{1}{|\ln h|})$ près, au rapport des longueurs entre les deux arcs de cercle reliant les deux points A_1 et A_2 du cercle de rayon 1 situés à la verticale du point B du cercle de rayon $\frac{1}{\sqrt{1+e^{2t\pi}}}$ et d'angle β . Donc:

$$\frac{1}{R} = \frac{\pi}{\arccos\left(\frac{|\cos \beta|}{\sqrt{1+e^{2t\pi}}}\right)} - 1$$

Par exemple, pour $\frac{E}{h} \rightarrow 0$ (donc $t \rightarrow 0$) dans le cas du double puits symétrique ($\beta = 0$), on obtient:

$$\frac{1}{R} = \frac{\pi}{\arccos \frac{1}{\sqrt{2}}} - 1 = 3.$$

Remarque 2 *On aurait pu également étudier le rapport:*

$$\tilde{r}_n = \frac{\lambda_{n+1} - \lambda_n}{\langle \Delta \lambda \rangle},$$

où $\langle \Delta\lambda \rangle$ désigne l'écart moyen entre deux valeurs propres (en pratique $\langle \Delta\lambda \rangle$ est l'écart entre deux valeurs critiques de la fonction F_h définie en (21)) comme dans [4]. Ce qui donne dans le cas du double puits symétrique pour $t = 0$ alternativement $\frac{1}{2}$ et $\frac{3}{2}$, généralisant ainsi le résultat de [4, p. 245, table III].

Passons maintenant à la preuve rigoureuse de la formule (22). On part de l'équation (21). On posera dans la suite:

$$F_h(t) = \cos f_h(t) - \frac{1}{\sqrt{1+e^{2t\pi}}} \cos \frac{b(th, h)}{h}, \quad (23)$$

où on rappelle que:

$$f'_h(t) = -\ln h + O(1) \quad (24)$$

uniformément par rapport à t (borné). On en déduit facilement que f_h est inversible près de $t = 0$ lorsque h est suffisamment petit.

Suivant Sjöstrand, on étudie la fonction F_h en commençant par donner son tableau de variations. On cherche tout d'abord les points critiques de F_h . Comme

$$\partial_t F = -f'_h(t) \sin f_h(t) + \frac{1}{2} 2\pi(1+e^{2t\pi})^{-3/2} \cos \frac{b(th, h)}{h} + (1+e^{2t\pi})^{-1/2} b'(th, h) \sin \frac{b(th, h)}{h}, \quad (25)$$

si t_c est un point critique, alors en combinant (24) et (25), on a:

$$\sin f_h(t_c) = O\left(\frac{1}{\ln h}\right).$$

La hessienne en t_c est donc:

$$\begin{aligned} F''_h(t_c) &= -f''_h(t_c) \sin f_h(t_c) - f_h'^2(t_c) \cos f_h(t_c) + O(1) \\ &= -f_h'^2(t_c) \pm 1 + O(1) \\ &= \mp (\ln h)^2 + O(1). \end{aligned}$$

On a donc forcément un extrémum local en t_c . Comme on est en dimension 1, la seule possibilité est d'avoir alternativement des minima et des maxima locaux. Regardant la hessienne en t_c , on a donc en un maximum $\cos f_h(t_c) = 1 + O\left(\frac{1}{(\ln h)^2}\right)$ et en un minimum $\cos f_h(t_c) = -1 + O\left(\frac{1}{(\ln h)^2}\right)$ donc en un maximum, $F(t_c) > 0$ et en un minimum $F(t_c) < 0$. Il existe ainsi exactement un zéro de F_h entre deux valeurs critiques de F_h (et réciproquement).

Calculons maintenant l'écart entre deux valeurs critiques (ce qui permettra en particulier de donner la formule de Weyl généralisée). Le résultat est que l'on peut indexer les valeurs critiques par un entier k tel que:

$$f_h(t_c) = k\pi + O\left(\frac{1}{\ln h}\right) \quad (26)$$

donc, d'après (24), l'écart entre deux valeurs critiques successives est $\frac{\pi}{\ln h}$. En effet, on observe d'abord qu'il y a au plus un extrémum vérifiant (26) car deux

extrêma successifs correspondent à des valeurs de k de parité différente en vertu de l'équation $\cos f_h(t_c) = \pm 1 + O(\frac{1}{(\ln h)^2})$. Ensuite, soit $t_k = f_h^{-1}(k\pi)$, on a alors $F'_h(t_k) = O(1)$ et $F''_h(t_k) = (-1)^k(\ln h)^2 + O(1)$ donc F'_h s'annule dans l'intervalle $[t_k - \frac{C}{(\ln h)^2}, t_k + \frac{C}{(\ln h)^2}]$. Ceci justifie l'équivalent du nombre de valeurs propres dans un intervalle du type $[Ah, Bh]$.

Soit maintenant t_0 un zéro de F . On a alors:

$$\begin{aligned}
 F(t_c) - F(t_0) &= \int_{t_0}^{t_c} F'(t) dt \\
 &= - \int_{t_0}^{t_c} [f'_h(t) \sin f_h(t) + O(1)] dt \\
 &= [\cos f_h(t)]_{t_0}^{t_c} + O(t_0 - t_c) \\
 &= \cos f_h(t_c) - \cos f_h(t_0) + O(\frac{1}{\ln h})
 \end{aligned}$$

donc:

$$\cos f_h(t_0) = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{2\pi t_c}}} \cos \frac{b(t_c h, h)}{h} + O(\frac{1}{\ln h})$$

La preuve heuristique est ainsi justifiée (au sens où on peut faire comme si β ne variait pas pour estimer le rapport entre l'écart de valeurs propres successives).

A Démonstration du lemme 1.

Il s'agit de montrer le:

Lemme 2 Soit U une matrice unitaire:

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_2(\mathbb{C}), \quad U \neq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad U \neq \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_1} \\ e^{-i\theta_2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Alors:

1. 1 est valeur propre de U si et seulement si

$$d = \bar{a} \frac{1-a}{a-1}$$

2. 1 est valeur propre de U si et seulement si:

$$|a| \sin\left(\frac{\arg da - \pi}{2} - \arg a\right) = \sin\left(\frac{\arg da - \pi}{2}\right), \quad |d| = |a|.$$

Preuve |Remarquons d'abord que si $a = 1$ et U est unitaire, alors $b = 0$ et $c = 0$ (par unitarité) donc $d = e^{i\theta}$ et U est de la forme que l'on a exclu. Si $a = 0$, alors $|c| = 1$ donc $d = 0$ puis $|b| = 1$ et U est de la forme que l'on a exclu.

1. Sens \Rightarrow :

Si le vecteur propre est $(1, 0)$ alors $a = 1$, cas exclu. Sinon, il est de la forme $(\mu, 1)$, on a alors $b = \mu(1-a)$ et $d = 1 - c\mu$. Par unitarité $\bar{a}b + \bar{c}d = 0$, donc $\bar{a}\mu(1-a) + \bar{c}(1-c\mu) = 0$ et $\mu = \frac{\bar{c}}{1-\bar{a}}$ donc

$$d = 1 - \frac{|c|^2}{1-\bar{a}} = \frac{1-\bar{a} - (1-|a|^2)}{1-\bar{a}} = \frac{\bar{a}(1-a)}{\bar{a}-1}.$$

Sens \Leftarrow :

Comme $a \neq 1$, on pose $\mu = \frac{b}{1-a}$. Par unitarité, on a

$$0 = \bar{a}b + \bar{c}d = \bar{a}\mu(1-a) + \bar{c}a \frac{1-a}{\bar{a}-1}$$

et comme $a \neq 1$ et $a \neq 0$, $c = (1-a)\bar{\mu}$. Donc U prend la forme:

$$U = \begin{pmatrix} a & (1-a)\mu \\ (1-a)\bar{\mu} & \bar{a} \frac{1-a}{\bar{a}-1} \end{pmatrix} \quad \text{d'où: } U \begin{pmatrix} \mu \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu \\ (1-a)|\mu|^2 + \bar{a} \frac{1-a}{\bar{a}-1} \end{pmatrix}.$$

Comme U est unitaire, on a $|\mu|^2|1-a|^2 = 1 - |a|^2$, donc:

$$(1-a)|\mu|^2 + \bar{a} \frac{1-a}{\bar{a}-1} = \frac{1-a}{(1-a)(1-\bar{a})} (1-a\bar{a}) + \bar{a} \frac{1-a}{\bar{a}-1} = \frac{1-a\bar{a} - \bar{a}(1-a)}{1-\bar{a}} = 1$$

et $(\mu, 1)$ est vecteur propre de U de valeur propre associée 1.

2. Sens \Rightarrow :

Si 1 est valeur propre, d'après 1., on a $\arg da = 2 \arg(1 - a) + \pi$. Il suffit donc de vérifier l'identité remarquable:

$$\sin \arg(1 - a) = |a| \sin(\arg(1 - a) - \arg a), \quad a \in \mathcal{C} - 0, 1$$

On a en effet:

$$|1 - a| \sin \arg(1 - a) = \Im(1 - a) = -\Im a$$

et:

$$\left| \frac{1}{a} - 1 \right| \sin \arg\left(\frac{1}{a} - 1\right) = \Im\left(\frac{1}{a} - 1\right) = \Im \frac{1}{a} = -\frac{1}{|a|^2} \Im a$$

donc:

$$|1 - a| \sin \arg(1 - a) = |a|^2 \left| \frac{1}{a} - 1 \right| \sin(\arg(1 - a) - \arg a) = |a| |1 - a| \sin(\arg(1 - a) - \arg a)$$

et on simplifie par $|1 - a|$.

Sens \Leftarrow :

Il suffit de montrer que l'équation:

$$\lambda \sin(\theta - \theta_0) = \sin \theta, \quad |\lambda| < 1, \theta_0 \text{ fixé}, \quad (27)$$

admet une solution unique dans $[0, \pi[$. On aura alors:

$$\frac{1}{2}(\arg da - \pi) = \arg(1 - a) \quad (\pi)$$

donc:

$$\arg da = 2 \arg(1 - a) + \pi \quad (2\pi)$$

qui joint à $|d| = |a|$ donne $d = \bar{a} \frac{1-a}{\bar{a}-1}$. Pour étudier (27), on la réécrit de façon équivalente:

$$\theta = \arcsin(\lambda \sin(\theta - \theta_0))$$

on applique alors le théorème du point fixe à la fonction

$$f(\theta) = \arcsin(\lambda \sin(\theta - \theta_0)) : \quad [0, \pi[\rightarrow [0, \pi[.$$

On a en effet:

$$f'(\theta) = \frac{\lambda \cos(\theta - \theta_0)}{\sqrt{1 - \lambda^2 \sin^2(\theta - \theta_0)}}, \quad \text{où } |f'| \leq |\lambda| < 1.$$

◇

References

- [1] R. Brummelhuis, T. Paul, and A. Uribe. Spectral estimates around a critical level. *Manuscrit, Reims*, 1993.
- [2] Y. Colin de Verdière and B. Parisse. Équilibre instable en régime semi-classique - I. Concentration microlocale. *Communications in Partial Differential Equations*, 19(9-10):1535–1563, 1994.
- [3] J. Connor. On the semi-classical approximation for double well potentials. *Chemical Physics Letters*, 4(7):419–420, 1969.
- [4] K. Ford, D. Hill, M. Wakeno, and J. Wheeler. Quantum Effects near a Barrier Maximum. *Annals of Physics*, 7:239–258, 1959.
- [5] N. Fröman. The energy levels of double-well potentials. *Arkiv för Fysik*, 32(4):79–97, 1966.
- [6] C. Gérard and A. Grigis. Precise estimates of tunneling and eigenvalues near a potential barrier. *Journal of Differential Equations*, 72:149–177, 1988.
- [7] B. Helffer and J. Sjöstrand. Semi-classical analysis for Harper’s equation-III. Cantor structure of the spectrum. *Bulletin de la Société Mathématique de France*, 117(4), 1989.
- [8] C. März. Spectral Asymptotics for Hill’s Equation near the potential maximum. *Asymptotic Analysis*, 5:221–267, 1992.
- [9] J. Sjöstrand. Density of state oscillations for magnetic Schrödinger operator. In Bennewitz, editor, *Differential Equations and Mathematical Physics*, pages 295–345, University of Alabama at Birmingham, March 15-21 1990.