



Spectre des Molécules Diatomiques dans l'Approximation de Born-Oppenheimer

B. Messirdi¹ and A. Senoussaoui^{1,2}

1. Université d'Oran Es-sénia, Département de Mathématiques, Faculté des Sciences,
B.P. 1524 El-Mnaouer, Oran, ALGERIA.

2. Université Libre de Bruxelles, Boulevard du Triomphe, Campus Plaine CP 214
SB1050 Brussels BELGIUM.

Corresponding author: asenouss@ulb.ac.be

Abstract

On étudie le spectre de $P = -h^2\Delta_x - \Delta_y + V(x, y; \mu)$ sur $L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^{3p})$ lorsque h tend vers zéro, $p \in \mathbb{N}^*$ et $\mu \in \mathbb{R}$, dans le cas où le potentiel $V(x, y; \mu)$ est singulier de type de Coulomb et radial (correspondant à $\mu = 0$) et où la première valeur propre de $Q(x; \mu) = -\Delta_y + V(x, y; \mu)$ sur $L^2(\mathbb{R}_y^{3p})$ présente une zone classiquement accessible non bornée. En régularisant P par des changements de variables adaptés et en utilisant une version formelle du calcul h -pseudo-différentiel matriciel à symbole opérateur, on montre l'existence de développements de type BKW pour les valeurs propres et les fonctions propres de P .

Classification AMS: 35P15, 35Q20, 35P99, 35S99..

I. INTRODUCTION

Soit l'opérateur $P = -h^2\Delta_x - \Delta_y + V(x, y; \mu) = -h^2\Delta_x + Q(x; \mu)$ sur $L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^{3p})$, lorsque $h \rightarrow 0^+$, où le potentiel $V(x, y; \mu) = V(x, y_1, \dots, y_p; \mu)$ est donné par:

$$V(x, y; \mu) = \sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k}{|x - \mu X_k|} + \sum_{j=1}^p \frac{\alpha_j^\pm}{|y_j \pm x|} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^p \frac{\alpha_{jk}}{|y_j \pm y_k|}.$$

α_k, α_j^\pm et α_{jk} sont des constantes réelles avec $\alpha_k > 0, \forall k \in \{1, \dots, n\}$ et $\alpha_j^\pm \leq 0, \forall j \in \{1, \dots, p\}, p \in \mathbb{N}^*$. $\mu X_1, \dots, \mu X_n$ représentent les positions de n noyaux fixes de la molécule si le paramètre μ est non nul.

Si $\mu \neq 0$ le potentiel $V(x, y; \mu)$ n'est pas radial en x , il perd sa symétrie sphérique en présence de l'interaction noyaux-noyaux

$$\sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k}{|x - \mu X_k|},$$

⁰© a GNPHE publication 2007, *ajmp@fsr.ac.ma*

qui n'est pas invariante par rotation autour de l'origine de \mathbb{R}^3 . L'étude spectrale de P , $\mu \neq 0$, est faite dans notre article [7], où l'on obtient un développement asymptotique complet en puissances de h des valeurs propres de P , en précisant la forme des fonctions propres associées. L'outil essentiel utilisé dans ce travail est la méthode de Feshbach [9] et la théorie générale de B. Helffer et J. Sjöstrand [2].

L'objet du présent article est de prouver si $\mu = 0$, l'existence de tels développements appelés solutions BKW en s'appuyant dans ce cas sur la symétrie sphérique de l'opérateur P , il s'agit d'un problème physiquement intéressant mais mathématiquement subtile à résoudre.

Comme dans le cas régulier (cf.[6,9]), les solutions BKW construites proviennent de la réduction de Feshbach en ramenant l'étude spectrale à celle d'un opérateur h -pseudo-différentiel ne dépendant que de x . Un potentiel Coulombien de type

$$V(x, y) = V(x, y; 0),$$

n'entre pas de manière naturelle dans un calcul h -pseudo-différentiel puisqu'il est singulier en x , il a été cependant montré dans [4] et [5] et plus récemment dans [7,8] que l'emploi d'un tel calcul est encore possible modulo un changement de variable permettant de localiser les singularités sur un compact de \mathbb{R}^3 et de régulariser $V(x, y)$.

En effet, il est connu d'après [4] que lorsqu'on veut étudier le spectre de P dans une région classiquement accessible compacte, on réduit le problème à une matrice finie d'opérateurs h -pseudo-différentiels à l'aide de changements de variables en y dépendant régulièrement en x .

Mais près d'un niveau d'énergie instable λ_0 plongé dans le spectre continu de P , la région classiquement accessible n'est pas bornée et donc on ne peut plus régulariser P par un nombre fini de changements de variables.

Pour palier à ce problème on adopte les techniques de [7], on commence par régulariser P en P^ζ près de l'ensemble de collision de la molécule $\mathcal{C} = \{0\}$ en annulant le potentiel $V(x, y)$ dans cette région par une troncature ζ sans trop modifier le spectre de P , on construit ensuite un changement de variable

$$y \mapsto y' = (\tau_x^0)^{-1}(y),$$

$x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$, $y \in \mathbb{R}^{3p}$, localisant les singularités de $V(x, y)$ sur la sphère unité de \mathbb{R}^3 et régularisant P loin de $\{0\}$. Puis par le biais du problème de Grushin, l'étude spectrale de P est ramenée à celle d'un opérateur h -pseudo-différentiel scalaire radial en x , cet opérateur commute avec les opérateurs de moment cinétique ses fonctions propres sont alors déterminées en coordonnées sphériques dans $L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr) \oplus L^2(S^2, d\theta)$ où S^2 est la sphère unité de \mathbb{R}^3 munie de la mesure de surface $d\theta$.

Le caractère sphérique de P rend les démonstrations plus techniques en donnant un certains nombres de résultats qualitatifs, il permet d'établir l'existence du spectre ponctuel de P et de fournir une nouvelle méthode de construction des valeurs propres et des fonctions propres formelles de P .

De plus, à l'aide d'estimations de type Agmon sur P , on vérifie que ces constructions formelles approximent correctement les vraies valeurs propres et les vraies fonctions propres de P .

II. HYPOTHÈSES ET RÉSULTATS

$\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$, l'opérateur $Q(x) = -\Delta_y + V(x, y)$ est auto-adjoint sur $H^2(\mathbb{R}_y^{3p})$, notons par $\lambda_1(x)$ sa première valeur propre elle est supposée discrète et associée à une fonction propre $u_1(x, y)$ normalisée dans $L^2(\mathbb{R}_y^{3p})$. Le lemme suivant montre que λ_1 et u_1 ne dépendent de x que par $|x|$.

Lemme 2.1:

Pour toute rotation orthogonale $R \in O(3)$,

$$u_1(Rx, Ry) = u_1(x, y), \lambda_1(Rx) = \lambda_1(x)$$

où $Ry = (Ry_1, \dots, Ry_p)$ et $O(3)$ est le groupe orthogonal de \mathbb{R}^3 .

Preuve:

Soit l'opérateur unitaire $\widehat{U}_R \varphi(y) = \varphi(Ry)$ sur $L^2(\mathbb{R}^{3p})$. Puisque Δ_y est $O(3)$ -invariant, alors

$$\widehat{U}_R^{-1} Q(x) \widehat{U}_R = Q(Rx).$$

On obtient ainsi le résultat car $\lambda_1(x)$ est simple en vertu du principe du Mini-Max.

On suppose que $\lambda_1(x)$ admet un minimum strict non dégénéré situé loin de $\{0\}$, c'est à dire le puits de potentiel $\Gamma = \lambda_1^{-1}(\lambda_0)$ créé par $\lambda_1(x)$ est de la forme:

$$(H1) \quad \Gamma = \{x \in \mathbb{R}^3; |x| = r_0 > 0 \text{ et } \partial_r^2 \lambda_1|_{\Gamma} > 0\}$$

$\lambda_0 = \inf_{x \neq 0} \lambda_1(x)$ et ∂_r est la dérivée radiale dans \mathbb{R}^3 . Si d_{λ_1} désigne la distance d'Agmon associée à la métrique dégénérée $(\lambda_1(x) - \lambda_0) dx^2$, alors d'après le lemme 2.1, la fonction $\psi(x) = d_{\lambda_1}(x, \Gamma)$ est $O(3)$ -invariante. D'autre part, on sait d'après [2] et [6] que ψ est de classe C^∞ dans un voisinage Ω de Γ de la forme:

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^3; |x| \in]r_0 - \varepsilon, r_0 + \varepsilon[\} \tag{2.1}$$

(où $\varepsilon > 0$ est choisi de tel sorte que $0 \notin \overline{\Omega}$), et

$$(\nabla \psi)^2(x) = \lambda_1(x) - \lambda_0, \forall x \in \Omega$$

On suppose aussi que $\lambda_1(x)$ est séparée du reste du spectre de $Q(x)$

$$(H2) \quad \inf_{x \in \Omega} \{Sp(Q(x)) \setminus \lambda_1(x)\} \geq \lambda_0 + \varepsilon/2$$

et que la région classiquement accessible $\lambda_1^{-1}([-\infty, b])$, avec $b > \lambda_0$, est non bornée dans \mathbb{R}^3 .

Soit $C_0 > 0$, fixé à l'extérieur du spectre de l'oscillateur harmonique unidimensionnel

$$H_0 = -1/2 \frac{d^2}{dr^2} + \lambda_1''(r_0)(r - r_0)^2,$$

on note par,

$$\left(e_j = (j + 1/2)(\lambda_1''(r_0))^{1/2} \right)_{j=1}^{N_0}$$

les N_0 valeurs propres de H_0 dans $[0, C_0]$. Le résultat essentiel de cet article est:

Théorème 2.2 :

Sous les hypothèses (H1) et (H2), P possède des valeurs propres réelles approchées $\lambda_j^l(h)$ associées à des fonctions propres formelles $w_j^{l,m}(h) \in H^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})$ telles que $\forall j \in \{1, \dots, N_0\}, \forall l \in \mathbb{N}, \forall m \in \{-l, \dots, l\}$ et $\forall h > 0$ assez petit, on a modulo $\mathcal{O}(h^\infty)$:

$$\lambda_j^l(h) = \lambda_0 + e_j h + \sum_{k \geq 2} \lambda_{j,k}^l h^k \tag{2.1}$$

$$e^{\psi(x)/h} w_j^{l,m}(x, y; h) = h^{-m_j} \left(w_{j,0}^{l,m}(x) u_1(x, y) + \sum_{k \geq 1} w_{j,k}^{l,m}(x, y) h^{k/2} \right) \tag{2.2}$$

avec $w_{j,0}^{l,m} \in C^\infty(\Omega)$, $w_{j,k}^{l,m} \in H^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})$ ($k \geq 1$), $m_j \in \mathbb{R}$, $m_1 = 1/4$ et

$$\begin{aligned} \langle w_j^{l,m}(h), w_{j'}^{l',m'}(h) \rangle_{L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})} &= \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} + \mathcal{O}(\langle^\infty) \\ \left\| e^{\psi(x)/h} (P - \lambda_j^l(h)) w_j^{l,m}(h) \right\|_{L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})} &= \mathcal{O}(\langle^\infty) \end{aligned} \tag{2.3}$$

III. LOCALISATION DES SINGULARITÉS ET RÉGULARISATION DU POTENTIEL

Dans cette section on reprend sans démonstrations les constructions de Messirdi et Senoussaoui [7] pour localiser les singularités et régulariser le potentiel $V(x, y)$.

Soit $\zeta \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$, $\zeta(x) = 1$ si $|x| \geq \frac{1}{N}$ et $\zeta(x) = 0$ si $|x| \leq \frac{1}{2N}$. Pour $\alpha_0 > \lambda_0$, posons

$$Q^\zeta(x) = -\Delta_y + \zeta(x) V(x, y) + (1 - \zeta(x)) \alpha_0,$$

et $P^\zeta = -h^2 \Delta_x + Q^\zeta(x)$ de domaine $H^2(\mathbb{R}^{3+3p})$. Puisque $Sp(P^\zeta) = Sp(P)$ modulo une erreur exponentiellement petite (cf. [5]), il est alors plus commode d'étudier le spectre de l'opérateur P^ζ au lieu de celui de P .

Soit $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$ tel que $0 \leq \chi \leq 1$, $\chi' \leq 0$,

$$\begin{aligned} \chi(s) &= 1 \text{ si } 0 \leq s \leq 1 \\ \chi(s) &= 0 \text{ si } s \geq 2 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Pour $r \geq \frac{1}{N}$ et $t \geq 0$, on considère la fonction

$$\rho(r, t) = \frac{t}{r} \chi\left(\frac{t}{r}\right) + Nt \left(1 - \chi\left(\frac{t}{r}\right)\right) \tag{3.2}$$

on a alors:

- (i) $\frac{\partial \rho}{\partial t} > 0$ sur $[\frac{1}{N}, +\infty[\times \mathbb{R}_+$
- (ii) $t \rightarrow \rho(r, t)$ est continue croissante donc bijective
- (iii) $\forall k \geq 1$, $\frac{\partial^k \rho}{\partial r^k}$ est uniformément borné sur $[\frac{1}{N}, +\infty[\times \mathbb{R}_+$

Soit α_r le difféomorphisme inverse de $t \rightarrow \rho(r, t)$. Par construction, on a:

$$\begin{cases} \alpha_r(t) = \frac{t}{N} & \text{pour } t \geq 2Nr \\ \alpha_r(t) = rt & \text{pour } t \leq 1 \end{cases} \tag{3.3}$$

Pour $|x| \geq \frac{1}{N}$, la fonction $\theta_x : \mathbb{R}^3 \ni s \rightarrow \alpha_{|x|}(|s|) \frac{s}{|s|} \in \mathbb{R}^3$, a les propriétés suivantes:

1. $\forall x \in \mathbb{R}^3$, $|x| \geq \frac{1}{N}$, la fonction θ_x est un difféomorphisme de \mathbb{R}^{\neq} dépendant de manière C^∞ de x et $\forall \alpha \in \mathbb{N}^3 \setminus \{0\}$, $\partial_x^\alpha \theta_x(s)$ est uniformément bornée sur $\{|x| \geq \frac{1}{N}, s \in \mathbb{R}^3\}$.

2.

$$\begin{cases} \theta_x\left(\frac{x}{|x|}\right) = x \\ \theta_x(s) = \frac{s}{N} \text{ si } |s| \geq 2N|x| \\ \theta_x(s) = |x|s \text{ si } |s| \leq 1 \end{cases} \tag{3.4}$$

Notons $y' = (y'_1, \dots, y'_p) = \sigma_x(y) = (\theta_x^{-1}(y_1), \dots, \theta_x^{-1}(y_p))$, $y = (y_1, \dots, y_p)$. σ_x est bien un difféomorphisme de \mathbb{R}^{3p} , il transforme $Q(x)$ en $\hat{Q}(x)$:

$$\widehat{Q}(x) = T(x, y', hD_{y'}; h) + \frac{\alpha}{|x|} + \sum_{j=1}^p \frac{\alpha_j^\pm}{|\theta_x(y'_j) \pm \theta_x(\frac{x}{|x|})|} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^p \frac{\alpha_{jk}}{|\theta_x(y'_j) - \theta_x(y'_k)|}, \alpha = \sum_{k=1}^n \alpha_k \tag{3.2}$$

où $T(x, y', hD_{y'}; h)$ est un opérateur différentiel elliptique de degré 2 en y' à coefficients réguliers par rapport à x et y' et uniformément bornés dans $\{|x| \geq \frac{1}{N}\} \times \mathbb{R}^{3p}$. Les singularités en y dépendant de x de $\widehat{Q}(x)$ sont maintenant localisées dans $\bigcup_j \{y'_j = \pm \frac{x}{|x|}\}$. L'opérateur P se transforme à son tour en:

$$\widehat{P} = \widetilde{T}(x, y', hD_x, hD_{y'}; h) + \widehat{Q}(x)$$

\widetilde{T} est un opérateur différentiel de degré 2 à coefficients réguliers et bornés sur $\{|x| \geq \frac{1}{N}\} \times \mathbb{R}^{3p}$.

Remarquons que P^ζ est un vrai opérateur h -pseudo-différentiel à symbole opérateur dans la région $\{x \in \mathbb{R}^3; |x| < \frac{1}{2N}\}$. Pour obtenir un opérateur régulier dans la région $|x| \geq \frac{1}{2N}$, on utilise un changement de variable similaire à celui introduit par Hunziker dans [3] composé avec σ_x .

Pour x_0 fixé tel que $|x_0| \geq \frac{1}{2N}$, et pour $x \neq 0$, avec $\frac{x}{|x|}$ assez proche de $\frac{x_0}{|x_0|}$, on définit la fonction F_{x_0} par:

$$F_{x_0}(x, s) = s + \left(\frac{x}{|x|} - \frac{x_0}{|x_0|}\right) (f_{x_0}(s) - f_{x_0}(-s)) \tag{3.6}$$

où $f_{x_0} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$, $f_{x_0}(\frac{x_0}{|x_0|}) = 1$ et $f_{x_0}(-\frac{x_0}{|x_0|}) = 0$. Si $\frac{x}{|x|}$ est dans un voisinage assez petit ω_{x_0} de $\frac{x_0}{|x_0|}$, la fonction $F_{x_0}(x, \cdot)$ est un C^∞ -difféomorphisme de \mathbb{R}^3 , dépendant de manière C^∞ par rapport à x et vérifiant:

$$F_{x_0}\left(x, \frac{x_0}{|x_0|}\right) = \frac{x}{|x|}, F_{x_0}\left(x, -\frac{x_0}{|x_0|}\right) = -\frac{x}{|x|}$$

$\forall \alpha \in \mathbb{N}^3, \exists C_\alpha > 0$, tel que:

$$\frac{1}{C_0} |s - s'| \leq |F_{x_0}(x, s) - F_{x_0}(x, s')| \leq C_0 |s - s'|$$

$$|\partial_x^\alpha F_{x_0}(x, s) - \partial_x^\alpha F_{x_0}(x, s')| \leq C_\alpha |s - s'| \tag{3.7}$$

$$|\partial_x^\alpha F_{x_0}(x, s)| \leq C_0 \quad (|\alpha| \geq 1)$$

Pour $x \in [\frac{1}{N}, +\infty[\omega_{x_0}$, on considère:

$$\tau_x^0 : \mathbb{R}^{3p} \longrightarrow \mathbb{R}^{3p}$$

$$y = (y_1, \dots, y_p) \rightarrow (\theta_x(F_{x_0}(x, y_1)), \dots, \theta_x(F_{x_0}(x, y_p)))$$

Lemme 3.1 :

τ_x^0 est un C^∞ -difféomorphisme vérifiant:

$\forall \alpha \in \mathbb{N}^3, \exists C'_\alpha > 0$ tel que $\forall x \in [\frac{1}{N}, +\infty[\omega_{x_0}$ et $\forall y, y' \in \mathbb{R}^{3p}$, on a:

$$\frac{1}{C'_0} |y - y'| \leq |\tau_x^0(y) - \tau_x^0(y')| \leq C'_0 (1 + |x|) |y - y'|$$

$$|\partial_x^\alpha \tau_x^0(y) - \partial_x^\alpha \tau_x^0(y')| \leq C'_\alpha |y - y'| \quad (|\alpha| \geq 1) \tag{3.8}$$

$$|\partial_x^\alpha \tau_x^0(y)| \leq C'_0 \quad (|\alpha| \geq 1)$$

Ainsi pour $x \in]\frac{1}{N}, +\infty[\omega_{x_0}$ le changement de variable $y \mapsto y' = (\tau_x^0)^{-1}(y)$ transforme l'opérateur $Q^\zeta(x)$ en:

$$\begin{aligned} Q_{x_0}^\zeta(x) &= T_{x_0}(x, y', hD_{y'}; h) + \frac{\zeta(x)\alpha}{|x|} + \sum_{j=1}^p \frac{\zeta(x)\alpha_j^\pm}{\left| \tau_x^0(y'_j) \pm \tau_x^0\left(\frac{x_0}{|x_0|}\right) \right|} \\ &+ \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^p \frac{\zeta(x)\alpha_{jk}}{\left| \tau_x^0(y'_j) - \tau_x^0(y'_k) \right|} + (1 - \zeta(x))\alpha_0 \\ &= T_{x_0}(x, y', hD_{y'}; h) + W_{x_0}^\zeta(x, y') \end{aligned} \tag{3.3}$$

$T_{x_0}(x, y', hD_{y'}; h)$ est un opérateur d'ordre deux elliptique en y à coefficients C^∞ par rapport à x et y et uniformément bornés dans $\{x \in \mathbb{R}^3, |x| \geq \frac{1}{N}\} \times \mathbb{R}^{3p}$. Il en découle du lemme 3.1 que $W_{x_0}^\zeta(x, y')$ est de classe C^∞ par rapport à x en tant qu'opérateur de $H^2(\mathbb{R}^{3p})$ dans $L^2(\mathbb{R}^{3p})$. On a alors obtenu la proposition suivante:

Proposition 3.2:

$\forall x_0 \in S^2$, il existe un voisinage ω_{x_0} de x_0 dans S^2 et une application τ_0 de classe C^∞ ,

$$\begin{aligned} \tau_0 :]\frac{1}{N}, +\infty[\omega_{x_0} \times \mathbb{R}^{3p} &\rightarrow \mathbb{R}^{3p} \\ (x, y) &\mapsto \tau_x^0(y) \end{aligned}$$

telle que pour tout x , τ_x^0 est un C^∞ -difféomorphisme de \mathbb{R}^{3p} et si on note par $U_0(x)\varphi(y) = \varphi(\tau_0(x, y))|\det(\partial_y \tau_0(x, y))|^{\frac{1}{2}}$, alors l'opérateur

$$Q_{x_0}^\zeta(x) = U_0(x) Q^\zeta(x) U_0^{-1}(x)$$

est dans $C_b^\infty(] \frac{1}{N}, +\infty[\omega_{x_0}; \mathcal{L}(H^2(\mathbb{R}^{3p}), L^2(\mathbb{R}^{3p})))$. C_b^∞ est l'ensemble des fonctions de classe C^∞ dont les dérivées de tout ordre sont uniformément bornées.

Remarque 3.3: En vertu de la proposition 3.2, l'opérateur différentiel $U_0(x) \frac{\partial}{\partial x_j} U_0^{-1}(x)$ définie sur $C_0^\infty(] \frac{1}{N}, +\infty[\omega_{x_0} \times \mathbb{R}^{3p})$ est égal à

$$\frac{\partial}{\partial x_j} + J_j(x, y) \frac{\partial}{\partial y} + K_j(x, y),$$

où $J_j, K_j \in C_b^\infty(] \frac{1}{N}, +\infty[\omega_{x_0} \times \mathbb{R}^{3p})$ avec

$$J_j(x, y) = \partial_{x_j} (\tau_x^0)^{-1}, \quad K_j(x, y) = |\det(\partial_y \tau_x^0)|^{1/2} \partial_{x_j} \left(|\det(\partial_y \tau_x^0)|^{-1/2} \right).$$

Par conséquent,

$$U_0(x) (-h^2 \Delta_x) U_0^{-1}(x) = h^2 (D_x + J(x, y) D_y + K(x, y))^2 \tag{3.10}$$

$$J(x, y) = \partial_x (\tau_x^0)^{-1}, \quad K(x, y) = |\det(\partial_y \tau_x^0)|^{1/2} D_x \left(|\det(\partial_y \tau_x^0)|^{-1/2} \right)$$

Par compacité de S^2 , on peut trouver un nombre fini d'ouverts $(\omega_j)_{j=1}^{j_0}$, tels que $\forall j \in \{1, \dots, j_0\}$, il existe une C^∞ -application τ_j de $] \frac{1}{N}, +\infty[\omega_j \times \mathbb{R}^{3p}$ dans \mathbb{R}^{3p} , où $\forall x \in] \frac{1}{N}, +\infty[\omega_j$, $\tau_j(x, \cdot)$ est un difféomorphisme de \mathbb{R}^{3p} . Si on note par $U_j(x)\varphi(y) = \varphi(\tau_j(x, y))|\det(\partial_y \tau_j(x, y))|^{\frac{1}{2}}$, alors

$$Q_j^\zeta(x) = U_j(x) Q^\zeta(x) U_j^{-1}(x) \in C_b^\infty\left(] \frac{1}{N}, +\infty[\omega_j; \mathcal{L}(H^2(\mathbb{R}^{3p}), L^2(\mathbb{R}^{3p}))\right)$$

IV. PREUVE DU THÉORÈME 2.2

Comme dans [5] proposition 5.1, il est facile de construire une fonction $w_1(x, y) \in C^0(\mathbb{R}^3, H^2(\mathbb{R}^{3p}))$, telle que:

(1) Pour $|x|$ assez grand $w_1(x, y) = u_1(x, y)$.

(2) $w_1 \in C^\infty(\{|x| < \frac{2}{N}\}, H^2(\mathbb{R}^{3p}))$

(3) $\forall j \in \{1, \dots, j_0\}; U_j(x) w_1(x, y) \in C_b^\infty([\frac{1}{N}, +\infty[\omega_j, H^2(\mathbb{R}^{3p}))$

Soient $\psi_1 \in C_0^\infty(\omega_1), \dots, \psi_{j_0} \in C_0^\infty(\omega_{j_0})$ et $\chi_0 \in C_0^\infty(|x| < \frac{3}{2N})$ tels que: $\sum_{j=1}^{j_0} \psi_j^4 = 1$ sur S^2 , $\chi_0 = 1$ près de $\{x \in \mathbb{R}^3; |x| \leq \frac{1}{N}\}$ et $(1 - \chi_0^4)^{\frac{1}{4}} \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$. Pour $j \in \{1, \dots, j_0\}$, posons:

$$\chi_j(x) = (1 - \chi_0^4(x))^{\frac{1}{4}} \psi_j\left(\frac{x}{|x|}\right) \tag{4.1}$$

Alors grâce au choix de χ_0 , on a $\sum_{j=0}^{j_0} \chi_j^4 = 1$ sur \mathbb{R}^3 , et $\text{supp}(\chi_j) \subset [\frac{1}{N}, +\infty[\omega_j, \forall j \in \{1, \dots, j_0\}$.

Théorème 4.1 :

Sous l'hypothèse (H2) et pour λ assez proche de λ_0 , il existe un opérateur h -pseudo-différentiel $E_{-+}^\zeta(\lambda)$ de symbole principal $\lambda - \xi^2 - \langle w_1(x, y), Q^\zeta(x) w_1(x, y) \rangle_Y$, tel que:

$$\lambda \in Sp(P^\zeta) \Leftrightarrow 0 \in Sp(E_{-+}^\zeta(\lambda))$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle_Y$ est le produit scalaire dans $L^2(\mathbb{R}^{3p})$. De plus, si la fonction ζ est choisie $O(3)$ -invariante alors l'opérateur $E_{-+}^\zeta(\lambda)$ est radial en x , i.e si on note par $U_R\varphi(x) = \varphi(Rx)$, $R \in O(3)$, on a:

$$[E_{-+}^\zeta(\lambda), U_R] = 0 \tag{4.2}$$

Preuve: Considérons l'opérateur de Grushin:

$$\mathcal{P}^\zeta(\lambda) = \begin{pmatrix} P^\zeta - \lambda & w_1(x, y) \\ \langle \cdot, w_1(x, y) \rangle_Y & 0 \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

défini sur $L^2(\mathbb{R}^{3(1+p)}) \oplus L^2(\mathbb{R}^{3p})$. En vertu de (H2) et pour λ assez proche de λ_0 , l'opérateur $\mathcal{P}^\zeta(\lambda)$ est inversible d'inverse

$$(\mathcal{P}^\zeta(\lambda))^{-1} = \begin{pmatrix} E^\zeta(\lambda) & E_+^\zeta(\lambda) \\ E_-^\zeta(\lambda) & E_{-+}^\zeta(\lambda) \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

$$\begin{aligned} E^\zeta(\lambda) &= \widehat{\pi}(x) [\widehat{\pi}(x) P^\zeta \widehat{\pi}(x) - \lambda]^{-1} \widehat{\pi}(x), \widehat{\pi}(x) = 1 - \pi(x) \\ E_+^\zeta(\lambda) &= w_1 - E^\zeta(\lambda) P^\zeta(\cdot w_1), E_-^\zeta(\lambda) = \langle (1 - P^\zeta E^\zeta(\lambda))(\cdot), w_1 \rangle_Y \\ E_{-+}^\zeta(\lambda) &= \lambda - \langle (P^\zeta - P^\zeta E^\zeta(\lambda) P^\zeta)(\cdot w_1), w_1 \rangle_Y \end{aligned}$$

$\pi(x)$ est la projection sur w_1 dans $L^2(\mathbb{R}^{3p})$. D'autre part, on a par construction:

$$\lambda \in Sp(P^\zeta) \Leftrightarrow 0 \in Sp(E_{-+}^\zeta(\lambda)) \tag{4.5}$$

(4.5) réduit l'étude spectrale de P sur $L^2(\mathbb{R}^{3(1+p)})$ à celle de l'opérateur $E_{-+}^\zeta(\lambda)$ sur $L^2(\mathbb{R}_x^3)$. Montrons que $E_{-+}^\zeta(\lambda)$ est un opérateur h -pseudo-différentiel, pour cela notons $U_0 = 1$,

$$U_j = \begin{pmatrix} U_j & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

sur $L^2 \left(\left[\frac{1}{N}, +\infty \right] [\omega_j \times \mathbb{R}^{3p}] \oplus L^2 \left(\mathbb{R}^{3p} \right) \right)$ et posons $\mathcal{P}_j^\zeta (\lambda) = \mathcal{U}_j \chi_j \mathcal{P}^\zeta (\lambda) \mathcal{U}_j^{-1} \chi_j, \forall j \in \{0, \dots, j_0\}$. Alors

$$\mathcal{P}_j^\zeta (\lambda) = \begin{pmatrix} P_j^\zeta - \lambda \chi_j^2 & \chi_j^2 w_{1,j} \\ \chi_j^2 \langle \cdot, w_{1,j} \rangle_Y & 0 \end{pmatrix}$$

$w_{1,j} = U_j w_1$ et $P_j^\zeta = U_j \chi_j P^\zeta U_j^{-1} \chi_j$. D'après la remarque 3.3, on a aussi:

$$P_j^\zeta = h^2 \chi_j (D_x + J_j(x, y) D_y + K_j(x, y))^2 \chi_j + \chi_j Q_j^\zeta(x) \chi_j \tag{4.6}$$

$$J_j(x, y) = \partial_x (\tau_j^{-1}(x, y)), K_j(x, y) = |\det(\partial_y \tau_j(x, y))|^{1/2} D_x \left(|\det(\partial_y \tau_j(x, y))|^{-1/2} \right)$$

avec $J_j, K_j \in C_b^\infty \left(\left[\frac{1}{N}, +\infty \right] [\omega_j \times \mathbb{R}^{3p}] \right)$. La formule (4.6) et la proposition 3.2 montrent que $\mathcal{P}_j^\zeta (\lambda)$ est un opérateur h -pseudo-différentiel matriciel à symbole opérateur dans $\mathcal{L} \left(H^2 \left(\mathbb{R}^{3p} \right) \oplus \mathbb{C}, L^2 \left(\mathbb{R}^{3p} \right) \oplus \mathbb{C} \right)$, son symbole principal est:

$$p_j(x, \xi; \lambda) = \chi_j^2(x) \begin{pmatrix} \xi^2 + Q_j^\zeta(x) - \lambda & w_{1,j}(x, y) \\ \langle \cdot, w_{1,j}(x, y) \rangle_Y & 0 \end{pmatrix} = \chi_j^2(x) \tilde{p}_j(x, \xi; \lambda) \tag{4.7}$$

$\tilde{p}_j(x, \xi; \lambda)$ est inversible pour tout λ assez proche de λ_0 et $(x, \xi) \in T^*(\text{supp}(\chi_j))$, son inverse $q_j(x, \xi; \lambda)$ est exprimé par:

$$q_j(x, \xi; \lambda) = \begin{pmatrix} X_j(x, \xi; \lambda) & w_{1,j}(x, y) \\ \langle \cdot, w_{1,j}(x, y) \rangle_Y & \lambda - \xi^2 - \langle w_1(x, y), Q^\zeta(x) w_1(x, y) \rangle_Y \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

$X_j(x, \xi; \lambda) = \hat{\pi}_j(x) \left[\hat{\pi}_j(x) \left(\xi^2 + Q_j^\zeta(x) - \lambda \right) \hat{\pi}_j(x) \right]^{-1} \hat{\pi}_j(x), \hat{\pi}_j(x) = (1 - \pi_j(x)), \pi_j(x) = U_j(x) \pi(x) U_j^{-1}(x)$. Posons

$$Q(\lambda) = \sum_{j=0}^{j_0} U_j^{-1} \chi_j^3(x) Op(q_j(x, \xi; \lambda)) U_j \chi_j(x) \tag{4.9}$$

on a d'après le théorème de composition des opérateurs h -pseudo-différentiels:

$$\mathcal{P}^\zeta(\lambda) Q(\lambda) = 1 + hR(h) \tag{4.10}$$

$$R(h) = \sum_{j=0}^{j_0} U_j^{-1} \chi_{j,1} R_j(\lambda) U_j \chi_{j,1} \tag{4.11}$$

avec $\chi_{j,1} \in C_b^\infty \left(\left[\frac{1}{N}, +\infty \right] [\omega_j] \right)$ à support dans $\left[\frac{1}{N}, +\infty \right] [\omega_{j,1}, (\omega_{j,1} \subset\subset \omega_j)]$ si $j \geq 1, \chi_{0,1} \in C_0^\infty \left(|x| \leq \frac{3}{2N} \right)$ est choisie comme χ_0 et $R_j(\lambda)$ est un opérateur h -pseudo-différentiel matriciel uniformément borné par rapport à h sur $L^2 \left(\mathbb{R}^{3(1+p)} \right) \oplus H^2 \left(\mathbb{R}^3 \right)$. On a de (4.10):

$$(\mathcal{P}^\zeta(\lambda))^{-1} = Q(\lambda) \sum_{m=0}^{+\infty} (-hR(h))^m \tag{4.12}$$

(4.12) peut aussi s'écrire modulo $\mathcal{O}(\infty)$:

$$(\mathcal{P}^\zeta(\lambda))^{-1} = \sum_{j=0}^{j_0} U_j^{-1} \tilde{\chi}_j \mathcal{E}_j(\lambda) U_j \tilde{\chi}_j \tag{4.13}$$

$\{\mathcal{E}_j(\lambda)\}_{j=0}^{j_0}$ sont des opérateurs h -pseudo-différentiels matriciels et les $\tilde{\chi}_j$ étant définits comme les $\chi_{j,1}$. Les formules (4.6), (4.9) et (4.13) montrent que $E_{-+}^\zeta(\lambda)$ est un opérateur h -pseudo-différentiel scalaire de symbole principal

$$\lambda - \xi^2 - \langle w_1(x, y), Q^\zeta(x) w_1(x, y) \rangle_Y.$$

$\forall R \in O(3)$, posons $\tilde{U}_R \varphi(x, y) = \varphi(Rx, Ry)$ et

$$U_R = \begin{pmatrix} \tilde{U}_R & 0 \\ 0 & \hat{U}_R \end{pmatrix}$$

$\tilde{U}_R, \hat{U}_R, U_R$ sont unitaires respectivement sur $L^2(\mathbb{R}^{3(1+p)})$, $L^2(\mathbb{R}^{3p})$, $L^2(\mathbb{R}^{3(1+p)}) \oplus L^2(\mathbb{R}^{3p})$. En utilisant le lemme 2.1 et le choix de la fonction ζ , on a par construction $w_1(Rx, Ry) = w_1(x, y)$ sur $\mathbb{R}^{3(1+p)}$. D'où

$$P^\zeta(\lambda) U_R = U_R P^\zeta(\lambda)$$

$$(P^\zeta(\lambda))^{-1} U_R = U_R (P^\zeta(\lambda))^{-1}$$

ce qui donne (4.2).

L'idée de la suite de la preuve consiste à utiliser une version formelle du théorème 4.1. Choisissons N assez grand de tel sorte que:

$$\Omega \subset \subset \bigcup_{j=1}^{j_0} \left[\frac{2}{N}, +\infty \right] \omega_j = \bigcup_{j=1}^{j_0} \Omega_j$$

ceci assure que $P^\zeta = P$ et $u_1 = w_1$ sur Ω .

$\forall j \in \{1, \dots, j_0\}$, considérons l'opérateur de Grushin:

$$\hat{\mathcal{P}}_j(\lambda) = U_j P U_j^{-1} = \begin{pmatrix} U_j P U_j^{-1} - \lambda & u_{1,j}(x, y) \\ \langle \cdot, u_{1,j}(x, y) \rangle_Y & 0 \end{pmatrix} \tag{4.14}$$

où $P(\lambda)$ est donné par (4.3) et $u_{1,j}(x, y) = U_j(x) u_1(x, y) \in C^\infty(\Omega_j, H^2(\mathbb{R}^{3p}))$. $\hat{\mathcal{P}}_j(\lambda)$ agissant sur l'espace des séries formelles d'indice $m \in \mathbb{R}$:

$$e^{-\psi/h} S^m(\Omega_j, H^2(\mathbb{R}^{3p}) \oplus \mathbb{C}) = e^{-\psi/h} \left\{ \sum_{j \geq 0} h^{-m+j/2} s_j, s_j \in C^\infty(\Omega_j, H^2(\mathbb{R}^{3p}) \oplus \mathbb{C}) \right\}$$

devient un opérateur h -pseudo-différentiel matriciel formel de symbole $\tilde{p}_j(x, \xi; \lambda) = \sum_{j \geq 0} h^j c_j(x, \xi; \lambda)$, $\lambda \in \mathbb{C}$, dont les coefficients c_j sont des fonctions C^∞ en $(x, \xi) \in \Omega \times \mathcal{V}$, \mathcal{V} est un voisinage assez petit de $(-i\nabla\psi(x))$. Son symbole principal est:

$$\hat{p}_{j,0}(x, \xi; \lambda) = \begin{pmatrix} \xi^2 + Q_j(x) - \lambda & u_{1,j}(x, y) \\ \langle \cdot, u_{1,j}(x, y) \rangle_Y & 0 \end{pmatrix} \tag{4.15}$$

où $Q_j(x) = U_j(x) Q(x) U_j^{-1}(x)$. D'après (H2) si $\lambda \in \mathbb{R}$ est assez proche de λ_0 , alors $\forall j \in \{1, \dots, j_0\}$ et $\forall (x, \xi) \in \Omega_j^* = \Omega_j \times \mathcal{V}$, $\hat{p}_{j,0}(x, \xi; \lambda)$ est inversible de $H^2(\mathbb{R}^{3p}) \oplus \mathbb{C}$ dans $L^2(\mathbb{R}^{3p}) \oplus \mathbb{C}$. Ceci nous permet de construire l'inverse formel $\hat{\mathcal{E}}_j(\lambda)$ de $\hat{\mathcal{P}}_j(\lambda)$:

$$\hat{\mathcal{E}}_j(\lambda) = \begin{pmatrix} \hat{E}_j^-(\lambda) & \hat{E}_j^+(\lambda) \\ \hat{E}_j^-(\lambda) & \hat{E}_j^+(\lambda) \end{pmatrix} \tag{4.16}$$

$\hat{E}_j^-(\lambda)$, $\hat{E}_j^\pm(\lambda)$ et $\hat{E}_j^{+}(\lambda)$ sont des opérateurs h -pseudo-différentiels formels à symboles analytiques en (ξ, λ) assez proche de $(-i\nabla\psi(x), \lambda_0)$. $\forall j \in \{1, \dots, j_0\}$, $\hat{E}_j^{+}(\lambda)$ (resp. $\hat{E}_j^{+}(\lambda)$) a pour symbole principal $\lambda - \xi^2 - \lambda_1(x)$ (resp. $U_j(x) u_1(x, y)$)

Puisque $P(\lambda) = U_j^{-1} \hat{\mathcal{P}}_j(\lambda) U_j = U_l^{-1} \hat{\mathcal{P}}_l(\lambda) U_l$ sur $\Omega_j \cap \Omega_l$, on a les conditions de compatibilités:

$$\hat{\mathcal{E}}_l(\lambda) = U_l U_j^{-1} \hat{\mathcal{E}}_j(\lambda) U_j U_l^{-1} \text{ sur } \Omega_j \cap \Omega_l$$

d'où,

$$\widehat{E}_j^{-+}(\lambda) = \widehat{E}_l^{-+}(\lambda) \text{ sur } \Omega_j \cap \Omega_l \tag{4.17}$$

Par recollement sur Ω on définit un opérateur h -pseudo-différentiel formel global $\widehat{E}_{-+}(\lambda)$ de symbole principal $\lambda - \xi^2 - \lambda_1(x)$. En utilisant l'analyticité du symbole de $\widehat{E}_{-+}(\lambda)$ par rapport à ξ , on vérifie alors qu'il coïncide avec le symbole de l'opérateur $E_{-+}(\lambda)$ obtenu dans le théorème 4.1. En particulier,

$$\left[\widehat{E}_{-+}(\lambda), U_R \right] = 0 \text{ sur } e^{-\psi/h} S^m(\Omega, \mathbb{C}), \forall R \in \mathcal{O}(3) \tag{4.18}$$

ceci implique que $\widehat{E}_{-+}(\lambda)$ est radial en x , donc ses fonctions propres formelles doivent se chercher sous la forme $\alpha(r) Y_l^m(\theta)$, où $r = |x|$, $\theta = \frac{x}{|x|}$ et les Y_l^m , $l \in \mathbb{N}$, $-l \leq m \leq l$ sont les harmoniques sphériques de \mathbb{R}^3 . Si on note par \mathcal{H}_\dagger l'espace engendré par Y_l^m , $-l \leq m \leq l$, on a la représentation suivante (cf.[1]):

$$\widehat{E}_{-+}(\lambda) = \bigoplus_{l=0}^{+\infty} E_{-+}^l(\lambda) \otimes 1_{\mathcal{H}_\dagger} \tag{4.19}$$

$1_{\mathcal{H}_\dagger}$ est l'indicatrice de l'espace \mathcal{H}_\dagger et si $\alpha(r) \in e^{-\psi(r)/h} S^m(\Omega', \mathbb{C})$ ($\Omega' =]r_0 - \varepsilon, r_0 + \varepsilon[$):

$$E_{-+}^l(\lambda) \alpha_{m,m'} = \langle \widehat{E}_{-+}(\lambda) \alpha Y_l^m, Y_l^{m'} \rangle_{L^2(S^2, d\theta)} \tag{4.20}$$

Si $F_l(\lambda) = \lambda - E_{-+}^l(\lambda)$, alors $F_l(\lambda)$ est un opérateur h -pseudo-différentiel scalaire formel de symbole principal $\rho^2 + \lambda_1(r)$, où ρ est la variable duale de r . De plus, puisque $E_{-+}^l(\lambda)$ est formellement auto-adjoint pour la mesure $r^2 dr$ et que $\lambda_1(r)$ admet un minimum strict non dégénéré en r_0 , on peut alors appliquer les constructions de Helffer-Sjöstrand (cf.[2], §3, théorème 3.7) à l'opérateur $F_l(\lambda)$, ceci assure l'existence du spectre ponctuel de P et fourni N_0 séries formelles du type:

$$\alpha_j^l(r, h; \lambda) = h^{-m_j} e^{-\psi(r)/h} \sum_{k \geq 0} \alpha_{j,k}^l(r; \lambda) h^{k/2} \tag{4.21}$$

associées à des valeurs propres formelles:

$$\mu_j^l(h; \lambda) = \lambda_0 + e_j h + \sum_{k \geq 2} \mu_{j,k}^l(\lambda) h^k \tag{4.22}$$

$\alpha_{j,k}^l(\cdot; \lambda) \in C^\infty(\Omega', \mathbb{R})$, $m_j \in \mathbb{R}$, $\mu_{j,k}^l(\lambda) \in \mathbb{R}$, $1 \leq j \leq N_0$, $l \in \mathbb{N}$, telles qu'on a dans $e^{-\psi(r)/h} S^m(\Omega', \mathbb{C})$:

$$\begin{aligned} E_{-+}^l(\lambda) \alpha_j^l(r, h; \lambda) &= (\lambda - \mu_j^l(h; \lambda)) \alpha_j^l(r, h; \lambda) \\ &\langle \alpha_j^l(\cdot, h; \lambda), \alpha_{j'}^l(\cdot, h; \lambda) \rangle_{L^2(\Omega')} = \delta_{j,j'} \end{aligned} \tag{4.23}$$

De plus, par analyticité en λ du symbole de $E_{-+}^l(\lambda)$ et des coefficients $\mu_{j,k}^l(\lambda)$, et $\alpha_{j,k}^l(r; \lambda)$, l'équation $\lambda = \mu_j^l(h; \lambda)$ admet une solution dans l'espace des séries formelles données par:

$$\lambda_j^l(h) = \lambda_0 + e_j h + \sum_{k \geq 2} h^k \frac{1}{k!} \partial_\lambda^{k-1} \left\{ \sum_{n \geq 2} \mu_{j,n}^l(\lambda) h^n \right\} \Big|_{\lambda=\lambda_0} \tag{4.24}$$

Posons $\alpha_j^l(r; h) = \alpha_j^l(r, h; \lambda = \lambda_j^l(h))$, on a:

$$E_{-+}^l(\lambda_j^l(h)) \alpha_j^l(r; h) = 0 \text{ dans } e^{-\psi(r)/h} S^{m_j}(\Omega', \mathbb{C}) \tag{4.25}$$

soit $\beta_j^{l,m}(x; h) = \alpha_j^l(|x|; h) Y_l^m\left(\frac{x}{|x|}\right)$, $-l \leq m \leq l$, alors:

$$\begin{aligned} \widehat{E}_{-+}(\lambda_j^l(h)) \beta_j^{l,m}(x; h) &= \bigoplus_{p=0}^{+\infty} \left(E_{-+}^p(\lambda_j^l(h)) \otimes 1_{\mathcal{H}_\dagger} \right) \alpha_j^l(|x|; h) Y_l^m\left(\frac{x}{|x|}\right) \\ &= \bigoplus_{p=0}^{+\infty} E_{-+}^p(\lambda_j^l(h)) \alpha_j^l(|x|; h) \delta_{p,l} \\ &= E_{-+}^l(\lambda_j^l(h)) \alpha_j^l(|x|; h) = 0 \text{ dans } e^{-\psi(x)/h} S^{m_j}(\Omega, \mathbb{C}) \end{aligned} \tag{4.1}$$

$$\langle \beta_j^{l,m}, \beta_{j'}^{l',m'} \rangle_{L^2(\Omega)} = \langle \alpha_j^l, \alpha_{j'}^{l'} \rangle_{L^2(\Omega')} \langle Y_l^m, Y_{l'}^{m'} \rangle_{L^2(S^2)} = \delta_{j,j'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \tag{4.27}$$

Posons

$$\tilde{v}_{j,k}^{l,m} = \widehat{E}_k^+(\lambda_j^l(h)) \beta_j^{l,m} \tag{4.28}$$

Puisque $\widehat{E}_k^+(\lambda)$ applique $e^{-\psi/h} S^m(\Omega_k, \mathbb{C})$ dans $e^{-\psi/h} S^m(\Omega_k, H^2(\mathbb{R}^{3p}))$, alors $\tilde{v}_{j,k}^{l,m} \in e^{-\psi/h} S^{m_j}(\Omega_k, H^2(\mathbb{R}^{3p}))$.

$$\begin{aligned} \widehat{P}_k(\lambda_j^l(h)) (\tilde{v}_{j,k}^{l,m} \oplus 0) &= (0 \oplus \beta_j^{l,m}) \\ (U_k P U_k^{-1} - \lambda_j^l(h)) \tilde{v}_{j,k}^{l,m} &= 0 \text{ dans } e^{-\psi/h} S^{m_j}(\Omega_k, L^2(\mathbb{R}^{3p})) \\ \beta_j^{l,m}(x; h) &= \langle \tilde{v}_{j,k}^{l,m}(x, y; h), u_{1,k}(x, y) \rangle_Y \end{aligned} \tag{4.2}$$

comme $\widehat{E}_k^+(\lambda) = U_k(x) u_1(x, y) + \mathcal{O}(h)$, on a donc:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{v}_{j,k}^{l,m}, \tilde{v}_{j',k}^{l',m'} \rangle_{L^2(\Omega_k \times \mathbb{R}^{3p})} &= \langle \beta_j^{l,m}, \beta_{j'}^{l',m'} \rangle_{L^2(\Omega)} \langle u_1, u_1 \rangle_Y + \mathcal{O}(h) \\ &= \delta_{j,j'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} + \mathcal{O}(h) \end{aligned} \tag{4.30}$$

Puisque

$$U_i^{-1} \widehat{\mathcal{E}}_i(\lambda) U_i = U_k^{-1} \widehat{\mathcal{E}}_k(\lambda) U_k \text{ sur } \Omega_i \cap \Omega_k$$

alors

$$U_i^{-1} \tilde{v}_{j,i}^{l,m} = U_k^{-1} \tilde{v}_{j,k}^{l,m} \text{ sur } \Omega_i \cap \Omega_k$$

$1 \leq i, k \leq j_0, 1 \leq j \leq N_0, l \in \mathbb{N}, -l \leq m \leq l$. Ce qui donne à l'aide du théorème de recollement un symbole formel global $\tilde{w}_j^{l,m}$ dont les coefficients sont dans $H^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})$. Resommons les séries $\tilde{v}_{j,k}^{l,m}(h)$ et $\tilde{w}_j^{l,m}(h)$, on peut trouver des fonctions $v_{j,k}^{l,m}(h) \in C^\infty(\Omega_k, H^2(\mathbb{R}^{3p}))$ et $w_j^{l,m}(h) \in H^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})$, telles que:

$$U_k(x) w_j^{l,m}(x, y; h) = v_{j,k}^{l,m}(x, y; h) \tag{4.31}$$

d'après (4.27), (4.29) et (4.31), on a:

$$w_j^{l,m}(x, y; h) = e^{-\psi(x)/h} h^{-m_j} \left\{ w_{j,0}^{l,m}(x) u_1(x, y) + \sum_{k \geq 1} w_{j,k}^{l,m}(x, y) h^{k/2} \right\}$$

où $w_{j,0}^{l,m}(x) \in C^\infty(\Omega)$ car $\beta_j^{l,m} \in C^\infty(\Omega)$.

En vertu de (4.28) et (4.31) on a aussi:

$$(P - \lambda_j^l(h)) w_j^{l,m}(h) = 0 \text{ dans } e^{-\psi/h} S^{m_j}(\Omega, L^2(\mathbb{R}^{3p}))$$

en utilisant ensuite l'estimation sur le reste du théorème de la phase stationnaire, on obtient:

$$\langle w_j^{l,m}(h), w_{j'}^{l',m'}(h) \rangle_{L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})} = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} + \mathcal{O}(h) \tag{4.32}$$

puisque P est auto-adjoint, alors:

$$\begin{aligned} & \left(\lambda_j^l(h) - \lambda_{j'}^{l'}(h) \right) \langle w_j^{l,m}(h), w_{j'}^{l',m'}(h) \rangle_{L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})} = \\ & \langle \lambda_j^l(h) w_j^{l,m}(h), w_{j'}^{l',m'}(h) \rangle_{L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})} - \langle w_j^{l,m}(h), \lambda_{j'}^{l'}(h) w_{j'}^{l',m'}(h) \rangle_{L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})} = \\ & \langle P w_j^{l,m}(h), w_{j'}^{l',m'}(h) \rangle_{L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})} - \langle w_j^{l,m}(h), P w_{j'}^{l',m'}(h) \rangle_{L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})} + \mathcal{O}(h^\infty) \\ & = \mathcal{O}(h^\infty) \end{aligned} \tag{4.33}$$

Cette équation montre que les fonctions propres associées aux différentes valeurs propres sont orthonormalisées modulo $\mathcal{O}(h^\infty)$, mais (4.32) assure l'orthonormalisation des fonctions propres associées à la même valeur propre $\lambda_j^l(h)$. Justifions maintenant les constructions formelles obtenues.

Soient $j_0 \in \{1, \dots, N_0\}$ et $C > 0$ une constante assez grande tels que $\lambda_0 + e_{j_0}h + Ch^2 \notin Sp(P_0)$ où P_0 est la réalisation auto-adjointe de $-h^2\Delta_x + \lambda_1(x) + h^2 < -\Delta_x u_1(x, y), u_1(x, y) >_Y$ sur Ω avec conditions de Dirichlet au bord. Si on note par $I(h) =]-\infty, \lambda_0 + e_{j_0}h + Ch^2]$, alors d'après la proposition 1.5 de [4]:

$$N_1 = \#Sp(P) \cap I(h) = \#Sp(P_0) \cap I(h) \tag{4.34}$$

Proposition 4.2 :

Les valeurs propres $E_1(h), E_2(h), \dots, E_{N_1}(h)$ de P dans $I(h)$ admettent des développements asymptotiques du type:

$$E_j(h) \sim \lambda_0 + e_{j_0}h + \sum_{k \geq 2} \alpha_{j,k}h^k, \quad h \rightarrow 0, \quad (\alpha_{j,k} \in \mathbb{R}), \quad j \in \{1, \dots, N_1\} \tag{4.35}$$

si $E_j(h)$ est asymptotiquement simple (au sens que le développement (4.35) la définit de manière unique) et si $v_j(x, y; h)$ désigne la fonction propre associée, alors $e^{-\psi(x)/h}v_j(x, y; h)$ possède dans $H^1(\Omega, L^2(\mathbb{R}^{3p}))$ un développement asymptotique du type:

$$e^{-\psi(x)/h}v_j(x, y; h) \sim h^{-m_{j_0}} \left(v_{j,0}(x)u_1(x, y) + \sum_{k \geq 2} v_{j,k}(x, y)h^{k/2} \right) \tag{4.36}$$

où $v_{j,0}(x) \in C^\infty(\Omega), v_{j,k}(x, y) \in H^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p})$.

Preuve: Soient $\chi \in C_0^\infty(\Omega), \chi = 1$ près de $\Gamma, \tilde{\mathcal{F}}$ l'espace engendré par l'ensemble $\{\chi(x)w_{j_0}^{l,m}(x, y; h); \lambda_{j_0}^l(h) \in I(h)\}$ et \mathcal{F} l'espace propre associé aux valeurs propres de P dans $I(h)$. (4.34) et la proposition 5.3 de [2] montrent respectivement:

$$\dim \mathcal{F} = \dim \tilde{\mathcal{F}}, \quad \sup_{v \in \tilde{\mathcal{F}}, \|v\|=1} \inf_{w \in \mathcal{F}} \|v - w\| = \mathcal{O}(h^\infty) \tag{4.37}$$

on trouve aussi par le même argument que les valeurs propres de P dans $I(h)$ admettent le développement (4.35) et qu'il existe une matrice orthogonale $(c_{j,k}(h))_{j,k}$ telle que $c_{j,k}(h) = 0$ si $\lambda_{j_0}^l(h)$ est non asymptotiquement égale à $E_l(h)$ et $\forall v_j \in \mathcal{F}$,

$$v_j = \sum_{k=1}^{N_1} c_{j,k}(h) \chi w_{j_0}^k + \mathcal{O}(h^\infty) \text{ dans } L^2(\Omega \times \mathbb{R}^{3p}) \tag{4.38}$$

où $w_{j_0}^k \in \{w_{j_0}^{l,m}, l \in \mathbb{N}, -l \leq m \leq l\}$.

Notons $v_j^* = \sum_{k=1}^{N_1} c_{j,k}(h) w_{j_0}^k$, et utilisons ensuite (4.28) et l'inégalité d'Agmon:

$$\langle e^{\phi(x)/h} P e^{-\phi(x)/h} u, u \rangle \geq \|h \nabla_x u\|^2 + \langle (\lambda_1(x) - (\nabla_x \phi)^2(x)) u, u \rangle$$

on a:

$$\left\| e^{\psi(x)/h} (v_j - v_j^*) \right\|_{H^1(K, L^2(\mathbb{R}^{3p}))} = \mathcal{O}(h^\infty)$$

où $K = \{x \in \Omega; \chi(x) = 1\}$. Ceci donne (4.36).

V. REFERENCES

-
- [1] R. Dautray et J.L. Lions, *Analyse mathématique et calcul numérique. volume 5, édition Masson, 1988.*
- [2] B. Helffer and J. Sjöstrand, *Multiples wells in the semiclassical limit I, Comm. P.D.E. vol 9 (4), 1984, p337-408.*
- [3] W. Hunziker, *Distorsion analyticity and molecular resonance curves, Ann. I.H.P. vol 45, 1986, p339-358.*
- [4] M. Klein, A. Martinez, R. Seiler and X.P. Wang, *On the Born-Oppenheimer expansion for polyatomic molecules, Comm. Maths. Phys. 1992, p 607-639.*
- [5] A. Martinez and B. Messirdi, *Resonances of diatomic molecules in the Born-Oppenheimer approximation, Comm. P.D.E. 19 (7/8), 1994, p1139-1162.*
- [6] B. Messirdi, *Asymptotique de Born-Oppenheimer pour la prédissociation moléculaire (cas de potentiels réguliers), Ann. I.H.P, vol 61, (3), 1994, p 255-292.*
- [7] B. Messirdi et A. Senoussaoui, *Méthode BKW Formelle et Spectre des Molécules Polyatomiques dans l'approximation de Born-Oppenheimer; Canadian Journal of Physics, vol 79, (4), 2001, p757-771.*
- [8] B. Messirdi, A. Senoussaoui and G. Djellouli, *Resonances of polyatomic molecules in the Born-Oppenheimer approximation, J. Maths. Phys. Vol 46, (103506), 2005, p1-14.*
- [9] A. Senoussaoui, *Asymptotic expansions for a general Hamiltonians in the Born-Oppenheimer approximation, African J. Maths. Phys. Vol 2, (1), 2005, p87-95.*