



HAL
open science

Approximation de Born-Oppenheimer en présence de (presque) croisement de surfaces d'énergie

Vidian Rousse

► **To cite this version:**

Vidian Rousse. Approximation de Born-Oppenheimer en présence de (presque) croisement de surfaces d'énergie. Mathématiques [math]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2004. Français. NNT : . tel-00006345

HAL Id: tel-00006345

<https://theses.hal.science/tel-00006345>

Submitted on 30 Jun 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

APPROXIMATION DE
BORN-OPPENHEIMER EN PRÉSENCE
DE (PRESQUE) CROISEMENT DE
SURFACES D'ÉNERGIE

ROUSSE Vidian

Table des matières

1	Approx. adiabatique avec presque croisement	15
1.1	Rappel sur le théorème adiabatique et ses améliorations	16
1.2	Lemme d'estimation d'erreur	19
1.3	Notion de presque croisement de valeurs propres et forme normale	20
1.4	Choix des vecteurs propres	21
1.4.1	Mise en situation	22
1.4.2	Construction des vecteurs propres	22
1.5	Enoncé du résultat	23
1.6	Loin du temps de croisement	24
1.6.1	Forme de l'approximation	24
1.6.2	Preuve du domaine de validité du Lemme 1.5	25
1.7	Au voisinage du temps de croisement	27
1.7.1	Forme de l'approximation	27
1.7.2	Preuve du domaine de validité du Lemme 1.6	28
1.8	Recollement des trois solutions	30
1.8.1	Lemme de recollement	31
1.8.2	Asymptotique des vecteurs propres dans deux régimes asymptotiques	32
1.8.3	Le presque croisement étroit ($\delta/\varepsilon \rightarrow 0$) : régime $ t /\delta \rightarrow +\infty$	34
1.8.4	Le presque croisement critique ($\delta = \varepsilon$) : régime $ t /\varepsilon \rightarrow +\infty$	35
1.8.5	Le presque croisement large ($\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$) : régime $ t /\delta \rightarrow 0$	37
2	Autoadjonction et localisation du spectre essentiel	39
2.1	Rappel sur les fonctions à valeurs dans un espace de Banach	39
2.1.1	Fonctions par morceaux, gradient et laplacien p.p.	40
2.1.2	Dérivation	40
2.1.3	Intégrale de Bochner et convolution	40
2.2	Extensions autoadjointes d'opérateurs de Schrödinger	42
2.3	Essentielle autoadjonction	42
2.3.1	Le cas unidimensionnel ($d = 1$)	43
2.3.2	Le cas multidimensionnel ($d \geq 2$)	47
2.4	Localisation du spectre essentiel	52
3	Fonct. de Hermite et éq. de Schrödinger scal.	55
3.1	Opérateurs de créations et d'annihilations	55
3.1.1	Définitions	55
3.1.2	Relations de commutation	57
3.1.3	Opérateurs de multiplications et de dérivations	57
3.2	Fonctions de Hermite	58
3.2.1	Définitions	58
3.2.2	Actions des opérateurs de création et d'annihilation	58

3.2.3	Dualité et localisation dans l'espace des phases	60
3.2.4	Translation du point de localisation dans l'espace des phases	61
3.2.5	Polynômes de Hermite généralisés	62
3.2.6	Bases orthonormées de $L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$	64
3.2.7	Actions itérées des op. de mult. et dériv. sur la "base de Hermite"	64
3.2.8	Produit scalaire de deux fonctions de Hermite	67
3.2.9	Variation des fonctions de Hermite avec les paramètres A, B et a	67
3.2.10	Troncature des fonctions de Hermite autour du point de localisation	68
3.3	Équation de Schrödinger avec hamiltonien quadratique	69
3.3.1	Définition de l'hamiltonien et de l'équation de Schrödinger	69
3.3.2	Équations d'évolution des paramètres	69
3.3.3	Résolution de l'équation	69
3.4	Solutions approchées de l'équation de Schrödinger	70
4	Approx. de BO dépendante du temps avec presque croisement	73
4.1	Approximation de Born-Oppenheimer	74
4.1.1	Principe de l'approximation : séparation des variables et échelles spatiales multiples	74
4.1.2	Traitement de l'équation nucléaire (4.7)	76
4.1.3	Traitement de l'équation électronique (4.8)	77
4.1.4	Forme complète de l'approximation à l'ordre dominant et extension aux ordres suivants	77
4.1.5	Erreur à l'ordre 2 et effet exponentiellement petit de la troncature	78
4.1.6	Énoncé du résultat	80
4.2	Rappel sur un presque croisement de type I	80
4.3	Réduction heuristique au cas adiabatique et prédiction à la L-Z	81
4.4	Asymptotique des quantités classiques	82
4.5	Choix des vecteurs propres	83
4.5.1	Mise en situation : hypersurface de croisement <i>vs</i> zones de troncature	84
4.5.2	Construction des vecteurs propres	85
4.6	Enoncé du résultat	86
4.7	Loin du temps de croisement	87
4.8	Au voisinage du temps de croisement	88
4.8.1	Forme de l'approximation	88
4.8.2	Preuve du domaine de validité du Lemme 4.6	89
4.9	Le recollement	92
4.9.1	Asymptotiques des vecteurs propres	92
4.9.2	Le presque croisement étroit ($\delta/\varepsilon \rightarrow 0$) : régime $ t /\delta \rightarrow +\infty$	93
4.9.3	Le presque croisement critique ($\delta = \varepsilon$) : régime $ t /\varepsilon \rightarrow +\infty$	96
4.9.4	Le presque croisement large ($\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$) : régime $ t /\delta \rightarrow 0$	99
5	Approx. de BO indépendante du temps	103
5.1	Rappel sur la construction de quasimodes dans le cas scalaire	104
5.2	Construction de quasimodes en situation sans croisement	108
5.2.1	Réduction de l'hamiltonien à une forme diagonale à l'ordre dominant	108
5.2.2	Quasimodes pour l'hamiltonien réduit	108
5.2.3	Retour à l'hamiltonien initial	113
5.3	Construction de quasimodes en situation de croisement générique	114

A	Preuves du Chapitre 3	123
A.1	Preuve du Lemme 3.6	123
A.2	Preuve de la Proposition 3.12	124
A.3	Preuve de la Proposition 3.15	129
A.4	Preuve du Théorème 3.16	131
B	Preuves du Chapitre 4	135
B.1	Preuve de la Proposition 4.2 : Asympt. des quantités classiques	135
B.1.1	Trajectoires classiques associées aux valeurs propres $E_C(x, \delta)$. . .	135
B.1.2	Trajectoire classique associée à la valeur propre moyenne $E(x, \delta)$.	138
B.1.3	Complément pour les trajectoires classiques associées aux $E_C(x, \delta)$	139
B.1.4	Intégrales d'action classiques	139
B.1.5	Matrices de déformation du paquet d'ondes associées aux $E_C(x, \delta)$	140
B.2	Preuve de la Proposition 4.3	141
B.3	Preuve du Lemme 4.5	143
B.4	Asymptotiques des vecteurs propres statiques et dynamiques	150
B.4.1	Preuve du Lemme 4.7	150
B.4.2	Preuve du Lemme 4.8	150
B.4.3	Preuve du Lemme 4.9	151
C	Preuves du Chapitre 5	153
C.1	Preuve de la Proposition 5.2	153
C.2	Preuve du Corollaire 5.3	155

Remerciements

Je voudrais remercier en tout premier lieu Alain Joye pour avoir accepté de diriger cette thèse. Sa disponibilité (une question impromptue pouvant se transformer en une discussion de plus d'une heure) et ses conseils souvent judicieux ont beaucoup contribué à rendre agréables mes conditions de travail.

Clotilde Fermanian-Kammerer et Didier Robert ont accepté d'être les rapporteurs de cette thèse. Pour leur lecture critique et attentive aussi bien que pour leur présence dans ce jury, je leur suis extrêmement reconnaissant.

Yves Colin de Verdière, George Hagedorn et Stefan Teufel me font par ailleurs l'honneur de participer à ce jury de soutenance et contribuent à donner une touche internationale à mon travail. Pour les deux derniers mentionnés, je m'excuse d'ailleurs de l'utilisation quasi-exclusive de la langue française dans ce mémoire et lors de la soutenance.

En restant dans le domaine de l'international, je tiens aussi à remercier mes interlocuteurs lors de mes deux séjours au Virginia Tech de Blacksburg, Caroline Lasser et George Hagedorn ainsi que ceux qui ont contribué à rendre ce séjour dans un pays outre-atlantique fort divertissant et enrichissant : Mary Ellen, José, ...

Toute ma gratitude va aussi bien sûr à l'ensemble du personnel administratif de l'Institut Fourier (de la bibliothèque aux bureaux du premier étage en passant par la reprographie) qui trouve toujours un moyen de débrouiller nos tracasseries administratives, je pense en particulier à Arlette, Myriam, Françoise, Brigitte, ...

Je tiens à remercier également toute la population évolutive (nouveaux venus, plus anciens, récents thésés et déjà recrutés) des thésards de l'Institut Fourier et tout particulièrement mes camarades de bureau successifs qui ont pour la plupart subi la redaction de ce travail : Freddy, Olivier, Yan, Éric, Vincent D. et Ameer. Un merci tout particulier à Vincent B. pour toutes les discussions mathématiques, sportives et autres que l'on a pu partager durant ces quatre années de thèse.

Pour remonter plus loin dans mon histoire mathématique, je tiens aussi à rendre hommage à tous mes professeurs depuis le collège qui m'ont enseigné la rigueur et le goût de la recherche, je pense, entre autres, à Dug' le parieur de pizzas et Debô' la machine à écrire des cours propres au tableau ...

Je n'oublie pas non plus mes coéquipiers et coéquipières volleyeurs (passés et présents) de Meylan 2 qui m'ont permis de décrocher du stress et de la frustration de la recherche pour finir la soirée par une bonne bouffe après des matchs pleins de rebondissements et de bonne humeur ...

Je remercie aussi ma famille (de mes grands-parents au dernier venu Émilien) et mes proches et amis pour m'avoir toujours soutenu dans mon choix de me consacrer aux Mathématiques et m'avoir procuré tous ces moments inoubliables (beaucoup d'autres

sont encore sûrement à venir ...).

Enfin, je dédie cette thèse à Caroline pour sa patience et son indéfectible soutien. Elle a su, malgré un éloignement quasi-permanent depuis maintenant sept ans, me rappeler régulièrement les véritables valeurs de l'existence. Pour cela et bien d'autres choses, je lui en serai éternellement reconnaissant.

Introduction

Le but de cette dissertation est d'étudier l'approximation de Born-Oppenheimer à la fois dans un cadre dynamique et dans un cadre statique. Cette approximation, qui remonte à [BornOppen27], consiste à faire usage de la petitesse du rapport de masse entre les électrons qui gravitent dans le nuage électronique et les nucléons qui constituent les noyaux atomiques. On est alors amené relativement naturellement à considérer le problème de manière semiclassique, *i.e.* dans la limite où ce rapport tend vers 0. Une telle démarche s'est depuis longtemps avérée consistante avec les résultats physiques obtenus par les chimistes expérimentateurs. Bien que souvent associée à la théorie des opérateurs pseudodifférentiels (avec petit paramètre, cf. [Helffer97]), nous nous plaçons ici dans le cadre à la fois plus élémentaire et plus concret d'un point de vue outillage mathématique des paquets d'onde gaussiens (plus précisément produits d'un polynôme par une gaussienne mais on continuera à les appeler ainsi par commodité). Ces derniers sont des cas particuliers d'états cohérents qui ont connu des développements fort intéressants (cf. [Paul97]) aussi bien du point de vue propagatif (dynamique) que de celui des quasimodes (statique).

Une partie de cette dissertation a déjà fait l'objet de la publication [Rousse04] qui correspond approximativement aux Chapitres 1 et 4. Toutefois, la méthode employée a été ici beaucoup plus détaillée et décomposée. De plus, on a précisé tous les détails techniques et calculatoires (quitte à les renvoyer dans l'Annexe B pour soulager la première lecture) inévitables pour prouver ce genre de résultat.

Organisation de la dissertation

Le premier chapitre donne le premier élément dans la compréhension dynamique des presque croisements dans le cadre plus simple de l'approximation adiabatique. Il regroupe essentiellement tous les ingrédients techniques que l'on retrouvera plus tard dans le Chapitre 4 : solution approchée habituelle loin de la région de transition, résolution fine d'un problème modèle (forme normale) dans la région de transition et recollement de ces deux types de solution avec tous les problèmes asymptotiques que cela comporte (notamment au niveau des choix des vecteurs propres). Le principal résultat de ce chapitre est énoncé dans le Théorème 1.4.

Le second chapitre étudie de manière abstraite l'opérateur typique de l'approximation de Born-Oppenheimer. On y établit des résultats d'ordre mathématique qui donnent au problème physique un caractère bien posé : (essentielle) autoadjonction sur un domaine de fonctions tests très acceptable et mise en évidence de spectre discret dans certains intervalles d'énergie.

Le troisième chapitre s'attache à présenter les paquets d'onde (états cohérents) gaussiens et la plupart de leurs propriétés à la manière de [Hagedorn91] de façon à rendre les preuves les plus élégantes possibles. Leur intérêt essentiel réside dans le fait qu'ils permettent de résoudre exactement l'équation de Schrödinger scalaire avec hamiltonien dépendant du temps quadratique en position et en impulsion : c'est le deuxième élément qui va nous servir pour résoudre les problèmes de presque croisement dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer. Cette résolution ne fait bizarrement appel qu'à la dynamique classique : la trajectoire classique dans l'espace des phases, l'intégrale d'action (lagrangienne) et le flot (ici linéaire puisque l'hamiltonien est quadratique) classique. Enfin, on y a ajouté quelques éléments de géométrie pour essayer de comprendre un peu mieux l'influence du couple de matrices (A, B) dont l'évolution dépend du flot linéarisé autour de la trajectoire classique.

Le quatrième chapitre contient un des deux résultats principaux de cette dissertation, le Théorème 4.4, qui est le pendant du résultat obtenu dans le premier chapitre (Théorème 1.4). On y regroupe les deux éléments évoqués dans les Chapitres 1 et 3 avec quelques résultats élémentaires sur l'asymptotique de la mécanique classique pour un potentiel dépendant d'un petit paramètre et qui devient singulier quand ce dernier tend vers 0.

Le cinquième et dernier chapitre s'intéresse à l'approximation de Born-Oppenheimer unidimensionnel (il y a une seule coordonnée nucléaire) dans un cadre statique (recherche de quasimodes) pour des hamiltoniens électroniques matriciels et dont les valeurs propres présentent éventuellement des situations de croisement générique. Les principaux résultats y sont énoncés dans les Théorèmes 5.4 et 5.6 et confirment la validité de la règle de Bohr-Sommerfeld (déjà connue dans le cas des hamiltoniens scalaires) sans terme correctif particulier même en situation de croisement. Il est intéressant de remarquer que la plupart des méthodes (c'est le cas ici) employées pour traiter le problème statique utilise des résultats du problème dynamique.

Perspectives

Tout d'abord, en ce qui concerne les quasimodes du Chapitre 5 et bien que non mentionnés explicitement dans cette dissertation, des résultats partiels ont été obtenus en situation de presque croisement et demanderaient à être complétés, surtout pour des quasi-énergies proches de l'énergie (critique) de presque croisement. Cela requiert vraisemblablement de comprendre d'un point de vue plus dynamique la construction de quasimodes proposée dans [ColinParisse99] pour un potentiel scalaire présentant des maxima locaux et pour des quasi-énergies proches de l'énergie correspondant à un des maxima locaux (la technique d'intégration le long d'une trajectoire classique serait confrontée, entre autres, au fait que la trajectoire est parcourue en un temps infini...).

Par ailleurs, les premiers résultats obtenus ici pour les quasimodes dans le cadre matriciel avec ou sans croisement devraient permettre de donner une justification mathématique à ce que la communauté des chimistes appellent le "Frank-Condon principe" et cela fait l'objet d'un travail en cours en collaboration avec G. Hagedorn et S. Jilcott. Plus précisément et comme rappelé au Chapitre 5 de [Jilcott00], ce principe stipule qu'à l'ordre dominant en le petit paramètre qu'est le rapport de masse électrons/nucléons, une transition entre deux états électroniques se produit trop rapidement pour qu'il y ait

un ajustement instantané de la configuration vibratoire nucléaire. En particulier, ceci doit pouvoir se retrouver dans la décomposition, suivant les quasimodes précédemment construits, d'une fonction d'onde initialement associée à un niveau électronique et un état vibratoire et soumise à une impulsion laser qui provoque la transition d'un électron (l'évolution d'une telle fonction d'onde a été explicitée à divers ordres dans [Jilcott00]).

Quelques notations

Matrices

A^t	transposée de la matrice (réelle ou complexe) A
A^*	adjoint de la matrice complexe A
$\text{Tr}A$	trace de la matrice A
$\text{Com}A$	comatrice de la matrice A
$\mathcal{M}_d(\mathbb{C})$	espace des matrices complexes $d \times d$
$GL_d(\mathbb{C})$	groupe des matrices complexes inversibles $d \times d$
$U_d(\mathbb{C})$	groupe des matrices complexes unitaires $d \times d$
$O_d(\mathbb{R})$	groupe des matrices orthogonales réelles $d \times d$
$\text{Herm}_d(\mathbb{C})$	espace des matrices hermitiennes complexes $d \times d$
$\text{Herm}_d^{++}(\mathbb{C})$	cône des matrices hermitiennes définies positives complexes $d \times d$
$\text{Sym}_d(\mathbb{C})$	espace des matrices symétriques complexes $d \times d$
$\text{Sym}_d^{++}(\mathbb{R})$	cône des matrices symétriques définies positives réelles $d \times d$
$\text{Diag}_d(\mathbb{R})$	espace des matrices diagonales réelles $d \times d$
$\text{Diag}_d^{++}(\mathbb{R})$	cône des matrices diagonales définies positives réelles $d \times d$

Ensembles

\mathbb{S}^d	sphère unité de \mathbb{R}^{d+1}
$\overline{B}(a, r)$	boule fermée de centre a et de rayon r

Espaces fonctionnels

$\mathcal{C}_{(c)}^k(\Omega; E)$	espace des fonctions fortement \mathcal{C}^k (à support compact) d'un ouvert Ω de \mathbb{R}^d à valeurs dans un espace de Banach E
$L^p(\Omega; \mathbb{C})$	espace des fonctions L^p de Ω dans \mathbb{C}
$L^p(\Omega; E)$	espace des fonctions L^p de Ω dans un espace de Banach E
$L^p(\Omega; \mathcal{D})$	espace des fonctions L^p de Ω à valeurs p.p. dans un sous-espace vectoriel \mathcal{D} de E

Limites

$\delta \ll \varepsilon$	notation de contrainte asymptotique : δ, ε et δ/ε tendent simultanément vers 0
--------------------------	---

Chapitre 1

Approximation adiabatique pour des presque croisements de valeurs propres

Introduction

Ce premier chapitre est consacré à ce qui semble être un des cas les plus simples de presque croisement du point de vue dynamique. Il permettra d'exhiber dans un cas plus simple la plupart des arguments utiles dans le Chapitre 4. Certains calculs sont toutefois déjà un peu fastidieux mais ils seront conservés dans le corps du texte afin de suggérer la nature exacte des estimations nécessaires pour obtenir des résultats comme le Théorème 1.4.

On se place dans le cadre de l'approximation adiabatique avec un hamiltonien dépendant du temps dont deux niveaux sont très proches l'un de l'autre (séparés par un "gap" conformément à l'appellation anglosaxonne) seulement en un instant précis et d'autant plus proches que le paramètre adiabatique est petit (cf. Figure 1.1). On veut alors connaître la capacité de la fonction d'onde à transiter (au cours du temps) d'un niveau à l'autre en fonction de la vitesse de rapprochement des deux niveaux.

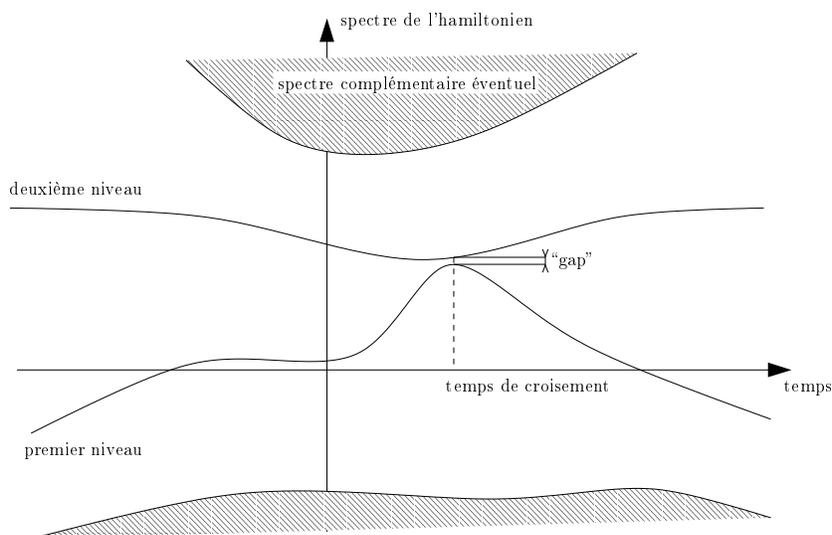


FIG. 1.1 – Rapprochement de deux niveaux pour un hamiltonien dépendant du temps.

Plus concrètement, soit \mathcal{H} un espace de Hilbert séparable et soit $H(t, \delta)$ une famille d'opérateurs autoadjoints (éventuellement non bornés) de domaine fixé \mathcal{D} dans \mathcal{H} suffisamment régulière en (t, δ) . On considère alors l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} \psi = H(t, \delta) \psi. \quad (1.1)$$

On suppose que le spectre de $H(t, \delta)$ comporte deux valeurs propres simples et isolées du reste du spectre $E_1(t, \delta)$ et $E_2(t, \delta)$ telles que $E_2(t, \delta) - E_1(t, \delta)$ tend vers 0 quand δ tend vers 0 par valeur supérieure et ce uniquement au point $t = t_0$ (cf. Figures 1.2 et 1.3). On se donne alors comme condition initiale le vecteur propre $\psi_1(t_0 - \beta, \delta)$ associé à la valeur propre $E_1(t_0 - \beta, \delta)$ de $H(t_0 - \beta, \delta)$ et on veut connaître au temps $t_0 + \beta$ la décomposition spectrale entre les deux niveaux $E_1(t_0 + \beta, \delta)$ et $E_2(t_0 + \beta, \delta)$ de la solution ψ de l'équation (1.1) quand les deux paramètres δ et ε tendent conjointement mais indépendamment vers 0.

Dans cette situation, on dispose d'une prédiction formelle pour la probabilité de transition donnée par la *formule de Landau-Zener* (cf. [Joye94] et [ColinPolLomb99] pour des preuves mathématiques de cette formule dans certains contextes)

$$\mathcal{P}_{1 \rightarrow 2} = \exp\left(-C \frac{\delta^2}{\varepsilon^2}\right) \quad (1.2)$$

où C est une constante qui dépend uniquement de la géométrie locale au voisinage du point de croisement $(t_0, 0)$. Cette prédiction fait apparaître trois transitions bien distinctes :

- $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$ (on parlera de *presque croisement étroit*) où la transition est quasi-totale avec une probabilité de suivre le même niveau d'ordre $\frac{\delta}{\varepsilon}$;
- $\delta = \varepsilon$ (on parlera de *presque croisement critique*) où la probabilité de transition est strictement comprise entre 0 et 1 ;
- $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$ (on parlera de *presque croisement large*) où la transition est quasi-inexistante et même exponentiellement petite.

Le but de ce chapitre va être de confirmer ces prédictions à l'ordre dominant et au premier ordre (en particulier, on ne prétend pas mettre en évidence de transition exponentiellement petite). La méthode proposée pour résoudre ce problème s'inspire très largement du travail effectuée par Hagedorn dans [Hagedorn91] dans le cas du presque croisement critique ($\delta = \varepsilon$) avec $H(t, \delta)$ réel symétrique.

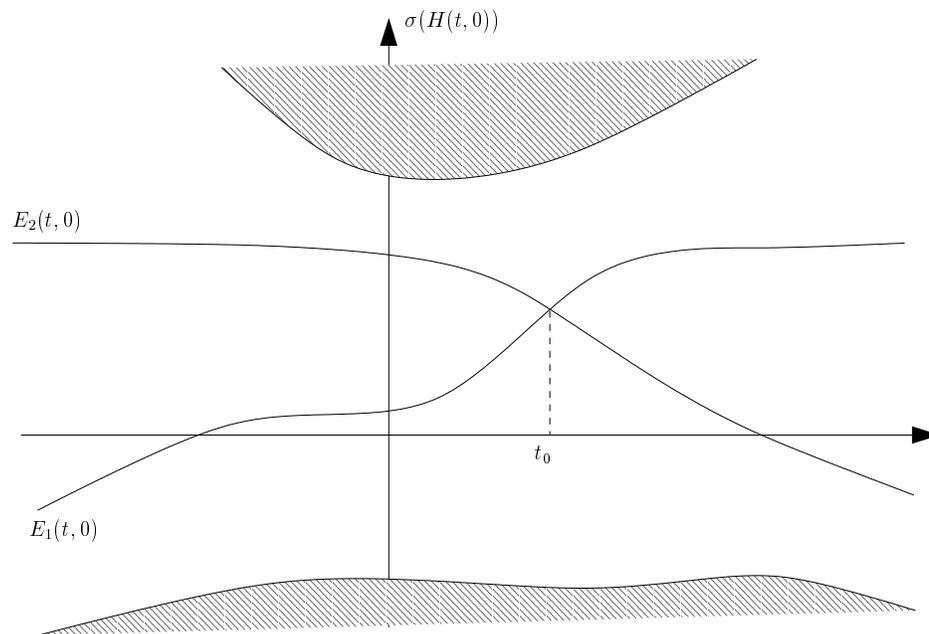
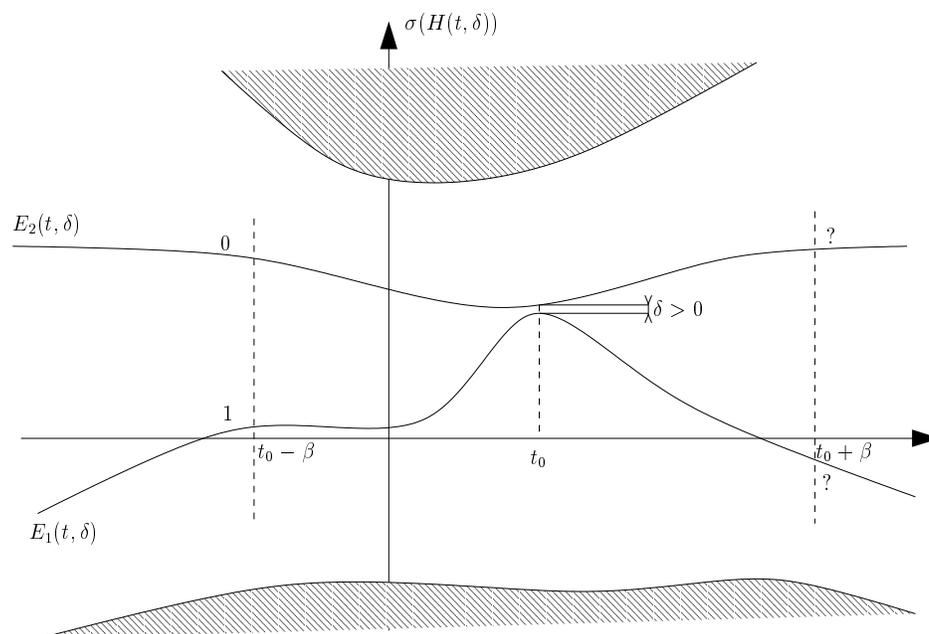
On notera enfin que le facteur ε^2 dans (1.1) correspond à un choix spécifique de l'échelle de temps qui donne le caractère "adiabatique" du problème, toutefois le choix fait ici (mis à part le fait d'être un petit paramètre destiné à tendre vers 0) n'a rien de crucial, ce qui ne sera pas le cas dans le contexte Born-Oppenheimer où l'échelle de temps choisie sera fortement corrélée au petit paramètre moléculaire du problème (le rapport de masse électrons/noyaux) mais nous y reviendrons.

1.1 Rappel sur le théorème adiabatique et ses améliorations

On cherche à résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} \psi = H(t) \psi \quad (1.3)$$

où $H(t)$ est une famille d'opérateurs autoadjoints de domaine fixé \mathcal{D} dans \mathcal{H} et dont la résolvente est \mathcal{C}^3 au sens fort en $t \in]t_0 - 2T, t_0 + 2T[$. On suppose que pour tout temps t ,

FIG. 1.2 – $\delta = 0$: les deux valeurs propres se croisent.FIG. 1.3 – $\delta > 0$: les deux valeurs propres “s’évitent”.

$H(t)$ admet une valeur propre simple $E(t)$, uniformément isolée du reste du spectre et de vecteur propre unitaire $\Phi(t)$ dont la phase est choisie pour vérifier la condition d'orthogonalité

$$\langle \Phi'(t) | \Phi(t) \rangle = 0.$$

On a alors le théorème adiabatique classique.

Théorème 1.1 *Si on pose*

$$\psi_a(t, \varepsilon) = \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_{t_0}^t E(\tau) d\tau\right) \Phi(t)$$

et si on note $\psi(t, \varepsilon)$ la solution de l'équation de Schrödinger (1.3) de condition initiale $\psi(t_0, \varepsilon) = \Phi(t_0)$, alors il existe une constante strictement positive $C(T)$ telle que

$$\sup_{t \in [t_0 - T, t_0 + T]} \|\psi(t, \varepsilon) - \psi_a(t, \varepsilon)\| \leq C(T)\varepsilon^2.$$

Remarque 1.1 Ce type de résultat remonte aux années 50 avec [Kato50] et a connu maintes améliorations et variations comme dans [Nenciu93], ... (on renvoie à [Teufel03] pour des informations plus détaillées).

Par ailleurs si on suppose de plus que $H(t)$ est de classe \mathcal{C}^{N+2} avec $N \geq 1$, on a l'amélioration suivante.

Théorème 1.2 *Il existe une procédure constructive explicite de fonctions $\phi_k(t)$ avec*

$$\phi_0(t) = \Phi(t)$$

telle que si on pose

$$\psi_N(t, \varepsilon) = \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_{t_0}^t E(\tau) d\tau\right) \left[\phi_0(t) + \varepsilon^2 \phi_1(t) + \dots + \varepsilon^{2N} \phi_N(t) + \varepsilon^{2N+2} \phi_{N+1}^\perp(t)\right]$$

et si on note $\psi(t, \varepsilon)$ la solution de l'équation de Schrödinger (1.3) de condition initiale $\psi(t_0, \varepsilon) = \psi_N(t_0, \varepsilon)$, alors il existe une constante strictement positive $C_N(T)$ telle que

$$\sup_{t \in [t_0 - T, t_0 + T]} \|\psi(t, \varepsilon) - \psi_N(t, \varepsilon)\| \leq C_N(T)\varepsilon^{2N}.$$

Remarques 1.2

1. La composante de $\phi_1(t)$ orthogonale à $\Phi(t)$ est donnée par la formule

$$\phi_1^\perp(t) = i(H(t) - E(t))_r^{-1} \Phi'(t)$$

où $(H(t) - E(t))_r^{-1}$ désigne la résolvante de $H(t)$ restreinte à l'orthogonal de $\Phi(t)$ prise en $E(t)$ ce qu'on utilisera dans la preuve du Lemme 1.5.

2. On signale enfin pour la culture qu'il existe une version analytique de ce théorème (qu'on pourra trouver dans [HagJoye02]) reposant sur un procédé de troncature optimale.

1.2 Lemme d'estimation d'erreur

Le lemme suivant (cf. [Hagedorn98]) qui repose sur une application du théorème fondamental du calcul intégral est l'outil de base qui permet de mesurer l'erreur entre des solutions exacte et approchée de même condition initiale de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar^\nu \frac{\partial \psi}{\partial r} = H(r, \hbar) \psi \quad (1.4)$$

et donc de démontrer le Théorème adiabatique 1.1 et ses améliorations ainsi que les Lemmes 1.5 et 1.6 qui vont suivre.

Lemme 1.3 *Soit $H(r, \hbar)$ une famille d'opérateurs autoadjoints sur un espace de Hilbert séparable \mathcal{H} . Supposons que $\psi(r, \hbar)$ appartienne au domaine de $H(r, \hbar)$, soit continûment différentiable en r , et résolve l'équation de Schrödinger (1.4) au sens approché suivant*

$$i\hbar^\nu \frac{\partial \psi}{\partial r}(r, \hbar) = H(r, \hbar) \psi(r, \hbar) + \zeta(r, \hbar)$$

où $\zeta(r, \hbar)$ vérifie

$$\|\zeta(r, \hbar)\| \leq \mu(r, \hbar)$$

sur l'intervalle de temps qui nous intéresse. On note $\Psi(r, \hbar)$ la solution exacte de l'équation de Schrödinger (1.4) de condition initiale $\Psi(r_0, \hbar) = \psi(r_0, \hbar)$. Alors, on a l'inégalité suivante

$$\|\Psi(r, \hbar) - \psi(r, \hbar)\| \leq \hbar^{-\nu} \left| \int_{r_0}^r \mu(\rho, \hbar) d\rho \right|.$$

Remarque 1.3 Le lemme reste valable si l'hamiltonien H , les fonctions d'ondes ψ et Ψ , l'erreur ζ et le majorant μ dépendent d'un paramètre supplémentaire δ comme cela va être le cas en situation de presque croisement.

Preuve L'hypothèse d'autoadjonction nous assure de l'existence d'un propagateur unitaire $U(r, r_0, \hbar)$ associé à l'équation de Schrödinger (1.4) (cf. [ReedSimonII75]). Le caractère unitaire du propagateur et le théorème fondamental du calcul intégral permettent alors de conclure ainsi

$$\begin{aligned} & \|\Psi(r, \hbar) - \psi(r, \hbar)\| \\ &= \|U(r, r_0, \hbar) \psi(r_0, \hbar) - \psi(r, \hbar)\| \\ &= \|\psi(r_0, \hbar) - U(r_0, r, \hbar) \psi(r, \hbar)\| \\ &= \left\| \int_{r_0}^r \frac{\partial}{\partial \rho} [\psi(r_0, \hbar) - U(r_0, \rho, \hbar) \psi(\rho, \hbar)] d\rho \right\| \\ &= \left\| \int_{r_0}^r \left[-i\hbar^{-\nu} U(r_0, \rho, \hbar) H(\rho, \hbar) \psi(\rho, \hbar) - U(r_0, \rho, \hbar) \frac{\partial \psi}{\partial \rho}(\rho, \hbar) \right] d\rho \right\| \\ &= \left\| \int_{r_0}^r (-i\hbar^{-\nu} U(r_0, \rho, \hbar) \zeta(\rho, \hbar)) d\rho \right\| \\ &\leq \hbar^{-\nu} \left| \int_{r_0}^r \|U(r_0, \rho, \hbar) \zeta(\rho, \hbar)\| d\rho \right| \\ &\leq \hbar^{-\nu} \left| \int_{r_0}^r \mu(\rho, \hbar) d\rho \right|. \end{aligned}$$

□

1.3 Notion de presque croisement de valeurs propres pour un hamiltonien dépendant du temps et forme normale du cas non dégénéré

Nous allons ici préciser encore un peu plus rigoureusement ce qu'on entend par un presque croisement et en donner l'allure générique.

Définition 1.1 Soit $H(t, \delta)$ une famille d'opérateurs autoadjoints de domaine fixé \mathcal{D} dans \mathcal{H} défini sur $]t_0 - 2T, t_0 + 2T[\times]-2\delta_0, 2\delta_0[$. On suppose que pour tout $\delta > 0$, $H(t, \delta)$ possède deux valeurs propres distinctes $E_{\mathcal{A}}(t, \delta)$ et $E_{\mathcal{B}}(t, \delta)$ à distance uniformément bornée du reste du spectre avec $E_{\mathcal{A}}(t, \delta) < E_{\mathcal{B}}(t, \delta)$ et que $E_{\mathcal{A}}(t_0, 0) = E_{\mathcal{B}}(t_0, 0)$, dans ce cas on dit que $H(t, \delta)$ admet un presque croisement en t_0 .

On reprend maintenant ici la réduction effectuée par Hagedorn dans [Hagedorn91] dans le cas réel symétrique.

Soit $P(t, \delta)$ le projecteur spectral associé aux valeurs propres $E_{\mathcal{A}}(t, \delta)$ et $E_{\mathcal{B}}(t, \delta)$, on pose

$$H_{||}(t, \delta) = H(t, \delta)P(t, \delta), \quad E(t, \delta) = \text{Tr}H_{||}(t, \delta), \quad H_0(t, \delta) = H(t, \delta) - E(t, \delta)Id. \quad (1.5)$$

Soit $\{\psi_1, \psi_2\}$ une base orthonormée de $P(t_0, 0)$, pour (t, δ) voisin de $(t_0, 0)$, on pose

$$\begin{aligned} \psi_1(t, \delta) &= \frac{P(t, \delta)\psi_1}{\langle \psi_1 | P(t, \delta)\psi_1 \rangle}, \\ \psi_2(t, \delta) &= \frac{P(t, \delta)\psi_2 - \langle \psi_1(t, \delta) | P(t, \delta)\psi_2 \rangle \psi_1(t, \delta)}{\|P(t, \delta)\psi_2 - \langle \psi_1(t, \delta) | P(t, \delta)\psi_2 \rangle \psi_1(t, \delta)\|}. \end{aligned}$$

Dans cette base orthonormée la restriction de $H_0(t, \delta)$ à $P(t, \delta)\mathcal{H}$ s'écrit

$$A(t - t_0) + B\delta + M(t, \delta)$$

où M est \mathcal{C}^3 à valeurs matricielles autoadjointes de trace nulle et vérifie $M(t_0, 0) = 0$, $\frac{\partial M}{\partial t}(t_0, 0) = 0$ et $\frac{\partial M}{\partial \delta}(t_0, 0) = 0$.

Définition 1.2 On dira que $H(t, \delta)$ admet un presque croisement non dégénéré en t_0 si $\{A, B\}$ est une famille libre de matrices autoadjointes de trace nulle.

Dans ce cas, en faisant tourner la base de manière indépendante de (t, δ) , on peut se ramener au cas où A est diagonale, puis en changeant la phase du deuxième vecteur de base, au cas où les deux coefficients hors diagonaux de B sont égaux et strictement positifs, ainsi

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -a \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b & c \\ c & -b \end{pmatrix}$$

où $a, c > 0$ et b est réel. On fait alors le changement de variable

$$\underline{t} = t - t_0 + \frac{b}{a}\delta, \quad \underline{\delta} = \frac{c}{a}\delta.$$

Ainsi la restriction de $H_{||}(t, \delta)$ à $P(t, \delta)\mathcal{H}$ s'écrit dans une base orthonormée \mathcal{C}^3

$$H_{||}(t, \delta) = \begin{pmatrix} b(\underline{t}, \underline{\delta}) & c(\underline{t}, \underline{\delta}) + id(\underline{t}, \underline{\delta}) \\ c(\underline{t}, \underline{\delta}) - id(\underline{t}, \underline{\delta}) & -b(\underline{t}, \underline{\delta}) \end{pmatrix} + E(t, \delta)I \quad (1.6)$$

où b, c, d et E sont \mathcal{C}^3 à valeurs réelles et vérifient

$$\begin{cases} b(\underline{t}, \underline{\delta}) &= r\underline{t} + O(\underline{t}^2 + \underline{\delta}^2) \\ c(\underline{t}, \underline{\delta}) &= r\underline{\delta} + O(\underline{t}^2 + \underline{\delta}^2) \\ d(\underline{t}, \underline{\delta}) &= O(\underline{t}^2 + \underline{\delta}^2) \\ E(t, \delta) &= O(1) \end{cases}$$

où $r > 0$.

Dans la suite, on abandonnera la notation soulignée pour ces variables.

On pose par ailleurs

$$\rho(t, \delta) = \sqrt{b(t, \delta)^2 + c(t, \delta)^2 + d(t, \delta)^2}$$

et $E_C(t, \delta) = E(t, \delta) + \nu^C \rho(t, \delta)$ où $\nu^A = 1$ et $\nu^B = -1$.

1.4 Choix des vecteurs propres

Intéressons nous tout d'abord au problème modèle

$$H_0(t, \delta) = \begin{pmatrix} t & \delta \\ \delta & -t \end{pmatrix}.$$

Dans ce cas, il est évident que si on autorise t et δ à varier dans $] -1, 1[$, on ne peut pas diagonaliser $H_0(t, \delta)$ de manière lisse en (t, δ) (pour $\delta = 0$ et $t \neq 0$, les droites propres sont engendrées par $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ tandis que pour $t = 0$ et $\delta \neq 0$, elles sont engendrées par $\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ et $\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$). C'est pourquoi, on s'intéresse ici au problème dans la limite δ tendant vers 0 avec $\delta > 0$. Dans ce cas, en passant en coordonnées polaires

$$t = \sqrt{t^2 + \delta^2} \cos(\theta(t, \delta)), \quad \delta = \sqrt{t^2 + \delta^2} \sin(\theta(t, \delta))$$

où $\theta(t, \delta)$ est unique dans $]0, \pi[$, la diagonalisation lisse par

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta(t, \delta)}{2} & \sin \frac{\theta(t, \delta)}{2} \\ -\sin \frac{\theta(t, \delta)}{2} & \cos \frac{\theta(t, \delta)}{2} \end{pmatrix}$$

est possible puisque $\theta(t, \delta)$ l'est. Malheureusement, si on revient au problème complet pour $H_0(t, \delta)$, même si $\delta > 0$ et à cause des termes en t^2 , on ne peut pas garantir que $c(t, \delta) > 0$, ce qui fait que la diagonalisation lisse précédente ne s'applique pas (de plus, le coefficient hors diagonal $d(t, \delta)$ n'est pas nécessairement nul ce qui fait qu'il faut utiliser des coordonnées sphériques). Toutefois, il est possible (cf. théorie des fibrés vectoriels dans [Husemoller66]) de choisir abstraitement des vecteurs propres réguliers associés à chacune de nos deux valeurs propres sur tout l'ouvert $] -2T, 2T[\times]0, 2\delta_0[$, par contre il sera alors difficile de contrôler leurs comportements quand (t, δ) tend vers $(0, 0)$. C'est pourquoi on va quand même faire des choix précis de vecteurs propres dans l'esprit du problème modèle. Plus précisément, on va en fait faire deux choix distincts suivant la position du triplet $\left(\frac{b}{\rho}, \frac{c}{\rho}, \frac{d}{\rho}\right)(t, \delta)$ sur la sphère \mathbb{S}^2 : on va distinguer les deux hémisphères (un peu épaissis) de façon à bien faire la différence entre les deux cas extrêmes où la matrice est déjà diagonale mais où les valeurs propres ne sont pas nécessairement ordonnées correctement ($b(t, \delta) = \pm \rho(t, \delta)$).

1.4.1 Mise en situation

On pose

$$Z_-(\delta) = \left\{ t \in I / b(t, \delta) < \frac{1}{2}\rho(t, \delta) \right\}$$

la zone “sud”,

$$Z_+(\delta) = \left\{ t \in I / b(t, \delta) > -\frac{1}{2}\rho(t, \delta) \right\}$$

la zone “nord” et

$$J(\delta) = \left\{ t \in I / \rho(t, \delta) > \frac{r}{2}\sqrt{t^2 + \delta^2} \right\}$$

la zone où le comportement en t et δ est à peu près le même (*i.e.* dans (1.6), tous les coefficients de la matrice sont du même ordre de grandeur).

On veut maintenant voir comment il faut choisir le couple (t, δ) pour être sûr que, si $t < 0$, $[-T, t] \subseteq (Z_-(\delta) \cap J(\delta))$ et si $t > 0$, $[t, T] \subseteq (Z_+(\delta) \cap J(\delta))$ autrement dit pouvoir contrôler le “gap” et le fait de rester dans le même hémisphère.

On note C_b, C_c, C_d et C_ρ des constantes strictement positives telles que, pour tout $(t, \delta) \in [-T, T] \times [0, \delta_0]$, on ait

$$|b(t, \delta) - rt| \leq C_b(t^2 + \delta^2),$$

$$|c(t, \delta) - r\delta| \leq C_c(t^2 + \delta^2),$$

$$|d(t, \delta)| \leq C_d(t^2 + \delta^2),$$

$$|\rho(t, \delta)^2 - r^2(t^2 + \delta^2)| \leq C_\rho(t^2 + \delta^2)^{3/2}.$$

Ainsi, si on diminue T et δ_0 de façon à avoir

$$T^2 + \delta_0^2 < \min\left(\frac{9r^4}{16C_\rho^2}, \frac{r^2}{16C_b^2}\right),$$

on a $[-T, 0] \subseteq (Z_-(\delta) \cap J(\delta))$ et $[0, T] \subseteq (Z_+(\delta) \cap J(\delta))$ pour tout $\delta \in [0, \delta_0]$. En effet, pour $[-T, 0]$, on a

$$\begin{aligned} \rho(t, \delta)^2 &\geq r^2(t^2 + \delta^2) - |\rho(t, \delta)^2 - r^2(t^2 + \delta^2)| \\ &\geq (t^2 + \delta^2) \left[r^2 - C_\rho(t^2 + \delta^2)^{1/2} \right] > \frac{r^2}{4}(t^2 + \delta^2) \end{aligned}$$

et

$$b(t, \delta) \leq rt + C_b(t^2 + \delta^2) < 0 + \frac{r}{4}(t^2 + \delta^2)^{1/2} < \frac{1}{2}\rho(t, \delta).$$

1.4.2 Construction des vecteurs propres

Définition des vecteurs propres

Posons pour simplifier (en omettant les arguments (t, δ))

$$B(t, \delta) = \frac{b}{\rho}, \quad C(t, \delta) = \frac{c}{\rho}, \quad D(t, \delta) = \frac{d}{\rho},$$

$$A(t, \delta) = C + iD,$$

$$f^-(t, \delta) = \sqrt{\frac{1-B}{2}}, \quad g^-(t, \delta) = \frac{A}{\sqrt{2(1-B)}},$$

$$f^+(t, \delta) = \sqrt{\frac{1+B}{2}}, \quad g^+(t, \delta) = \frac{A}{\sqrt{2(1+B)}}.$$

Définissons maintenant les vecteurs propres unitaires par

$$\Phi_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) = g^- \psi_1 + f^- \psi_2,$$

$$\Phi_{\mathcal{B}}^-(t, \delta) = -f^- \psi_1 + \overline{g^-} \psi_2,$$

pour $B(t, \delta) < 1$ (ce qui est le cas si $(t, \delta) \in [-T, 0] \times [0, \delta_0]$), et

$$\Phi_{\mathcal{A}}^+(t, \delta) = f^+ \psi_1 + \overline{g^+} \psi_2,$$

$$\Phi_{\mathcal{B}}^+(t, \delta) = -g^+ \psi_1 + f^+ \psi_2,$$

pour $B(t, \delta) > -1$ (ce qui est le cas si $(t, \delta) \in [0, T] \times [0, \delta_0]$).

Choix de phase des vecteurs propres

On va maintenant faire tourner ces vecteurs propres unitaires en posant

$$\underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^*(t, \delta) := e^{i\omega_{\mathcal{C}}^*(t, \delta)} \Phi_{\mathcal{C}}^*(t, \delta)$$

pour $\mathcal{C} = \mathcal{A}, \mathcal{B}$ et $*$ = +, -, en vue de satisfaire la condition d'orthogonalité suivante

$$\left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^*(t, \delta) \left| \frac{\partial}{\partial t} \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^*(t, \delta) \right. \right\rangle = 0.$$

On voit qu'il suffit d'avoir

$$\frac{\partial \omega_{\mathcal{C}}^*}{\partial t}(t, \delta) = i \left\langle \Phi_{\mathcal{C}}^*(t, \delta) \left| \frac{\partial \Phi_{\mathcal{C}}^*}{\partial t}(t, \delta) \right. \right\rangle$$

et on fait le choix (arbitraire) des conditions limites $\omega_{\mathcal{C}}^-(-T, \delta) = 0$ et $\omega_{\mathcal{C}}^+(T, \delta) = 0$.

1.5 Enoncé du résultat

Avec toutes les définitions et notations qui précèdent, on peut maintenant énoncer précisément le principal résultat de cette section.

Théorème 1.4 *Soit $H(t, \delta)$ un hamiltonien comme décrit à la Section 1.3 et $\psi(t, \delta, \varepsilon)$ la solution de l'équation de Schrödinger associée (1.1) telle que*

$$\psi(-T, \delta, \varepsilon) = \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^-(\delta, \varepsilon) \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^{-T} E_{\mathcal{C}}(\tau, \delta) d\tau\right) \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-(-T, \delta) \quad (1.7)$$

où $|\Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon)|^2 + |\Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon)|^2 = 1$, alors on a, dans la limite δ et ε tendant vers 0,

$$\left\| \psi(T, \delta, \varepsilon) - \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^T E_{\mathcal{C}}(\tau, \delta) d\tau\right) \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^+(T, \delta) \right\| = o(1) \quad (1.8)$$

où

$$\begin{pmatrix} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) \end{pmatrix} = S(\delta, \varepsilon) \begin{pmatrix} \Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon) \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon) \end{pmatrix},$$

avec,

- si $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$,

$$S(\delta, \varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\delta, \varepsilon)} \\ e^{i\omega_{\mathcal{B}\mathcal{A}}(\delta, \varepsilon)} & 0 \end{pmatrix}$$

- si $\delta = \varepsilon$,

$$S(\delta = \varepsilon, \varepsilon) = \begin{pmatrix} e^{i\omega_{\mathcal{A}}(\varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{4}} \frac{\sqrt{\pi r}}{\Gamma(1-\frac{ir}{2})} & -e^{i\omega_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{2}} \\ e^{i\omega_{\mathcal{B}\mathcal{A}}(\varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{2}} & e^{i\omega_{\mathcal{B}}(\varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{4}} \frac{\sqrt{\pi r}}{\Gamma(1+\frac{ir}{2})} \end{pmatrix}$$

- si $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$,

$$S(\delta, \varepsilon) = \begin{pmatrix} e^{i\omega_{\mathcal{A}}(\delta, \varepsilon)} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_{\mathcal{B}}(\delta, \varepsilon)} \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

où les différentes phases ne dépendent que du choix des phases initiales des vecteurs propres $\underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^*(t, \delta)$ et sont telles que la matrice $S(\delta, \varepsilon)$ est unitaire.

De plus, si $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$ et si $\delta/\varepsilon^{7/5} \rightarrow +\infty$, alors, avec

$$S(\delta, \varepsilon) = \begin{pmatrix} \frac{\delta}{\varepsilon} \sqrt{\pi r} e^{i\omega_{\mathcal{A}}(\delta, \varepsilon)} & \sqrt{1 - \pi r \frac{\delta^2}{\varepsilon^2}} e^{i\omega_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\delta, \varepsilon)} \\ \sqrt{1 - \pi r \frac{\delta^2}{\varepsilon^2}} e^{i\omega_{\mathcal{B}\mathcal{A}}(\delta, \varepsilon)} & \frac{\delta}{\varepsilon} \sqrt{\pi r} e^{i\omega_{\mathcal{B}}(\delta, \varepsilon)} \end{pmatrix},$$

on a (1.8) en remplaçant le terme d'erreur du second membre par $o\left(\frac{\delta}{\varepsilon}\right)$. De même si $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$ et si $\delta/\varepsilon^{1/2} \rightarrow 0$, alors on a encore (1.8) en remplaçant le terme d'erreur du second membre par $o\left(\frac{\varepsilon}{\delta}\right)$ et en conservant la matrice $S(\delta, \varepsilon)$ donnée en (1.9).

Remarque 1.4 Autrement dit et comme annoncé, les prédictions données par la formule de Landau-Zener (1.2) sont correctes jusqu'au premier ordre.

Toute la fin de ce chapitre va être consacrée à la preuve de ce théorème. Par souci de simplicité, on se place dans la situation où $\Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon) = 0$ et $\Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon) = 1$. La stratégie de la preuve est alors la suivante : on construit trois solutions approchées de l'équation de Schrödinger (1.1) sur trois intervalles de temps distincts $[-T, -t_r]$, $[-t_r, t_r]$ et $[t_r, T]$ puis on ajuste les constantes d'intégration présentes dans chacune de ces solutions pour qu'elles coïncident aux points de jonction des intervalles de temps (cf. Section 1.8.1 pour plus de détails sur la technique de recollement). Loin du temps de croisement $t = 0$, la construction reprend celle du Théorème adiabatique 1.1, il suffit seulement alors de contrôler précisément l'erreur commise en fonction de l'écart minimum entre les deux valeurs propres sur l'intervalle de temps considéré (cf. Section 1.6). Quant à la solution autour du temps de croisement $t = 0$, elle est construite à partir de l'allure locale de l'hamiltonien (1.6) qui conduit à un système explicitement résoluble (cf. Section 1.7).

1.6 Loin du temps de croisement

1.6.1 Forme de l'approximation

Lemme 1.5 Dans la région entrante $-T \leq t \leq -t_e \leq 0$, si on pose

$$\psi_E(t, \delta, \varepsilon) = \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^-(\delta, \varepsilon) \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E_{\mathcal{C}}(\tau, \delta) d\tau\right) \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-(t, \delta)$$

où $\Lambda_{\mathcal{C}}^-(\delta, \varepsilon)$ est choisi en $O(1)$ et si on note $\psi(t, \delta, \varepsilon)$ la solution de (1.1) de condition initiale $\psi(-T, \delta, \varepsilon) = \psi_E^-(-T, \delta, \varepsilon)$, alors il existe une constante strictement positive C telle que

$$\sup_{t \in [-T, -t_e]} \|\psi(t, \delta, \varepsilon) - \psi_E^-(t, \delta, \varepsilon)\| \leq C \frac{\varepsilon^2}{t_e^2 + \delta^2}.$$

Remarques 1.5

1. Pour l'instant, le temps t_e est indépendant de δ et ε ce qui ne sera déjà pas le cas dans son analogue dans le cadre Born-Oppenheimer, le Lemme 4.5. Par ailleurs, si δ est fixé à une valeur strictement positive, on retrouve le Théorème adiabatique 1.1.
2. On a un résultat analogue dans la région sortante $0 \leq t_e \leq t \leq T$ en remplaçant respectivement $\psi_E(t, \delta, \varepsilon)$, $\Lambda_{\mathcal{C}}^-(\delta, \varepsilon)$ et $\underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-(t, \delta)$ par $\psi_S(t, \delta, \varepsilon)$, $\Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon)$ et $\underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^+(t, \delta)$.

1.6.2 Preuve du domaine de validité du Lemme 1.5

On traite uniquement le cas $\Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon) = 0$ et $\Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon) = 1$. En fait, on raffine l'Ansatz donné dans l'énoncé en prenant (conformément au premier point des Remarques 1.2)

$$\begin{aligned} \psi_E(t, \delta, \varepsilon) = \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E_{\mathcal{B}}(\tau, \delta) d\tau\right) & \left[\underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-(t, \delta) + i\varepsilon^2 \right. \\ & \left. \times \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}}(t, \delta) - E_{\mathcal{B}}(t, \delta)} \left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) \left| \frac{\partial}{\partial t} \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-(t, \delta) \right. \right\rangle \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) + r_{\mathcal{B}}(t, \delta) P^\perp(t, \delta) \frac{\partial}{\partial t} \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^- \right) \right] \end{aligned} \quad (1.10)$$

où $P^\perp(t, \delta) = 1 - P(t, \delta)$ est le projecteur spectral sur l'orthogonal des sous-espaces propres associées aux valeurs propres $E_{\mathcal{A}}(t, \delta)$ et $E_{\mathcal{B}}(t, \delta)$ et où $r_{\mathcal{B}}(t, \delta)$ est la restriction à $P^\perp(t, \delta)\mathcal{H}$ de la résolvante de $H(t, \delta)$ prise en la valeur $E_{\mathcal{B}}(t, \delta)$.

L'erreur commise $\zeta_E(t, \delta, \varepsilon) = \exp\left(-i\varepsilon^{-2} \int_0^t E_{\mathcal{B}}(\tau, \delta) d\tau\right) \left[i\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} - H(t, \delta)\right] \psi_E(t, \delta, \varepsilon)$ est alors

$$\begin{aligned} & \varepsilon^4 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \right) (t, \delta) \left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-}{\partial t}(t, \delta) \right. \right\rangle \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) \\ & + \varepsilon^4 \frac{1}{E_{\mathcal{A}}(t, \delta) - E_{\mathcal{B}}(t, \delta)} \left\langle \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-}{\partial t}(t, \delta) \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-}{\partial t}(t, \delta) \right. \right\rangle \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) \\ & + \varepsilon^4 \frac{1}{E_{\mathcal{A}}(t, \delta) - E_{\mathcal{B}}(t, \delta)} \left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) \left| \frac{\partial^2 \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-}{\partial t^2}(t, \delta) \right. \right\rangle \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) \\ & + \varepsilon^4 \frac{1}{E_{\mathcal{A}}(t, \delta) - E_{\mathcal{B}}(t, \delta)} \left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-}{\partial t}(t, \delta) \right. \right\rangle \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{A}}^-}{\partial t}(t, \delta) \\ & \quad + \varepsilon^4 \frac{\partial r_{\mathcal{B}}}{\partial t}(t, \delta) P^\perp(t, \delta) \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-}{\partial t}(t, \delta) \\ & \quad + \varepsilon^4 r_{\mathcal{B}}(t, \delta) \frac{\partial P^\perp}{\partial t}(t, \delta) \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-}{\partial t}(t, \delta) \\ & \quad + \varepsilon^4 r_{\mathcal{B}}(t, \delta) P^\perp(t, \delta) \frac{\partial^2 \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-}{\partial t^2}(t, \delta). \end{aligned}$$

Il faut donc estimer les termes (on a omis les arguments (t, δ))

$$\frac{1}{E^{\mathcal{A}} - E^{\mathcal{B}}} = \frac{1}{2\rho}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{E^{\mathcal{A}} - E^{\mathcal{B}}} \right) = -\frac{\frac{\partial \rho}{\partial t}}{2\rho^2},$$

$$\frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t} = e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} \left(\frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t} - \left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^- \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t} \right. \right\rangle \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^- \right),$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t^2} = e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} & \left[\left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^- \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t} \right. \right\rangle^2 \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^- \right. \\ & \left. - 2 \left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^- \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t} \right. \right\rangle \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t} - \left\| \frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t} \right\|^2 \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^- - \left\langle \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^- \left| \frac{\partial^2 \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t^2} \right. \right\rangle \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^- + \frac{\partial^2 \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t^2} \right], \end{aligned}$$

$$\frac{\partial r_B}{\partial t}, \quad \frac{\partial P^\perp}{\partial t}.$$

Or

$$\begin{aligned} \Phi_{\mathcal{A}}^- &= g^- \psi_1 + f^- \psi_2, \\ \Phi_{\mathcal{B}}^- &= -f^- \psi_1 + \overline{g^-} \psi_2, \\ \frac{\partial \Phi_{\mathcal{A}}^-}{\partial t} &= \frac{\partial g^-}{\partial t} \psi_1 + \frac{\partial f^-}{\partial t} \psi_2 + g^- \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + f^- \frac{\partial \psi_2}{\partial t}, \\ \frac{\partial \Phi_{\mathcal{B}}^-}{\partial t} &= -\frac{\partial f^-}{\partial t} \psi_1 + \frac{\partial \overline{g^-}}{\partial t} \psi_2 - f^- \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + \overline{g^-} \frac{\partial \psi_2}{\partial t}, \\ \frac{\partial^2 \Phi_{\mathcal{A}}^-}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 g^-}{\partial t^2} \psi_1 + \frac{\partial^2 f^-}{\partial t^2} \psi_2 + 2 \frac{\partial g^-}{\partial t} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + 2 \frac{\partial f^-}{\partial t} \frac{\partial \psi_2}{\partial t} + g^- \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial t^2} + f^- \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial^2 \Phi_{\mathcal{B}}^-}{\partial t^2} &= -\frac{\partial^2 f^-}{\partial t^2} \psi_1 + \frac{\partial^2 \overline{g^-}}{\partial t^2} \psi_2 - 2 \frac{\partial f^-}{\partial t} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + 2 \frac{\partial \overline{g^-}}{\partial t} \frac{\partial \psi_2}{\partial t} - f^- \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial t^2} + \overline{g^-} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial t^2}. \end{aligned}$$

Estimations techniques On a

1. pour (L, l) l'un des couples de lettres (B, b) , (C, c) ou (D, d)

$$L(t, \delta) = \frac{l}{\rho}, \quad \frac{\partial L}{\partial t}(t, \delta) = \frac{\frac{\partial l}{\partial t} - L \frac{\partial \rho}{\partial t}}{\rho},$$

$$\frac{\partial^2 L}{\partial t^2}(t, \delta) = \frac{\frac{\partial^2 l}{\partial t^2} - L \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}}{\rho} + 2 \frac{L \frac{\partial \rho^2}{\partial t} - \frac{\partial l}{\partial t} \frac{\partial \rho}{\partial t}}{\rho^2} ;$$

2. pour ρ

$$\rho(t, \delta)^2 = b^2 + c^2 + d^2, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t}(t, \delta) = B \frac{\partial b}{\partial t} + C \frac{\partial c}{\partial t} + D \frac{\partial d}{\partial t},$$

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}(t, \delta) = B \frac{\partial^2 b}{\partial t^2} + C \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} + D \frac{\partial^2 d}{\partial t^2} + \frac{\partial B}{\partial t} \frac{\partial b}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial t} \frac{\partial d}{\partial t} ;$$

3. pour f^-

$$f^-(t, \delta) = \sqrt{\frac{1-B}{2}}, \quad \frac{\partial f^-}{\partial t} = -\frac{\frac{\partial B}{\partial t}}{2\sqrt{2(1-B)}},$$

$$\frac{\partial^2 f^-}{\partial t^2} = -\frac{\frac{\partial^2 B}{\partial t^2}}{2\sqrt{2(1-B)}} - \frac{\frac{\partial B}{\partial t}^2}{4\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} ;$$

4. pour g^-

$$g^-(t, \delta) = \frac{A}{\sqrt{2(1-B)}}, \quad \frac{\partial g^-}{\partial t} = \frac{\frac{\partial A}{\partial t}}{\sqrt{2(1-B)}} + \frac{A \frac{\partial B}{\partial t}}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}},$$

$$\frac{\partial^2 g^-}{\partial t^2} = \frac{\frac{\partial^2 A}{\partial t^2}}{\sqrt{2(1-B)}} + \frac{A \frac{\partial^2 B}{\partial t^2}}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} + \frac{\frac{\partial A}{\partial t} \frac{\partial B}{\partial t}}{\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} + \frac{3A \frac{\partial B}{\partial t}^2}{4\sqrt{2}(1-B)^{5/2}}.$$

Ainsi

1. pour (L, l) et ρ

$$\frac{\partial b}{\partial t} = O(1), \quad \frac{\partial c}{\partial t} = O(|t| + \delta), \quad \frac{\partial d}{\partial t} = O(|t| + \delta), \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = O(1), \quad \frac{\partial L}{\partial t} = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right),$$

$$\frac{\partial^2 l}{\partial t^2} = O(1), \quad \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \quad \frac{\partial^2 L}{\partial t^2} = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right) ;$$

2. pour m^- , avec $m = f, g$

$$m^- = O(1), \quad \frac{\partial m^-}{\partial t} = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \quad \frac{\partial^2 m^-}{\partial t^2} = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right).$$

D'où

1. pour le gap entre les deux valeurs propres

$$\frac{1}{E_{\mathcal{A}}(t, \delta) - E_{\mathcal{B}}(t, \delta)} = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}}\right)(t, \delta) = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right),$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}}\right)(t, \delta) = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^3}\right) \quad ;$$

2. pour les vecteurs propres

$$\frac{\partial \Phi_{\mathcal{C}}^-}{\partial t}(t, \delta) = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \quad \frac{\partial^2 \Phi_{\mathcal{C}}^-}{\partial t^2}(t, \delta) = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right) \quad ;$$

3. pour les vecteurs propres réorientés

$$\frac{\partial \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t}(t, \delta) = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \quad \frac{\partial^2 \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-}{\partial t^2}(t, \delta) = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right) \quad ;$$

4. pour la résolvante réduite

$$\frac{\partial r_{\mathcal{B}}}{\partial t}(t, \delta) = O(1), \quad \frac{\partial^2 r_{\mathcal{B}}}{\partial t^2}(t, \delta) = O(1) \quad ;$$

5. pour le projecteur spectral

$$\frac{\partial P^\perp}{\partial t}(t, \delta) = O(1), \quad \frac{\partial^2 P^\perp}{\partial t^2}(t, \delta) = O(1).$$

Finalement

$$\zeta_E(t, \delta, \varepsilon) = O\left(\frac{\varepsilon^4}{(|t| + \delta)^3}\right)$$

et on applique le Lemme 1.3 en calculant explicitement l'intégrale temporelle du majorant ci-dessus.

Pour conclure, on note alors que les termes en ε^2 dans l'Ansatz raffiné (1.10) sont bornés par $\frac{\varepsilon^2}{t^2 + \delta^2}$. \square

1.7 Au voisinage du temps de croisement

1.7.1 Forme de l'approximation

Lemme 1.6 *Dans la région intérieure $-t_i \leq t \leq t_i$, si on pose*

$$\psi_I(t, \delta, \varepsilon) = \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \delta) d\tau\right) \sum_{k=1,2} f_k\left(\frac{t}{\varepsilon}, \delta, \varepsilon\right) \psi_k(t, \delta)$$

avec

$$\begin{pmatrix} f_1(s, \delta, \varepsilon) \\ f_2(s, \delta, \varepsilon) \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} C_1(\delta, \varepsilon)e^{-irs^2/2} \\ C_2(\delta, \varepsilon)e^{irs^2/2} \end{pmatrix} & \text{si } \delta/\varepsilon \rightarrow 0 \\ \begin{pmatrix} C_1(\varepsilon)D_{-\frac{ir}{2}} + C_2(\varepsilon)\frac{1-i}{2}\sqrt{r}D_{\frac{ir}{2}-1} \\ -C_1(\varepsilon)\frac{1+i}{2}\sqrt{r}D_{-\frac{ir}{2}-1} + C_2(\varepsilon)D_{\frac{ir}{2}} \end{pmatrix} (-1+i)\sqrt{r}s & \text{si } \delta = \varepsilon \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} C_1(\delta, \varepsilon)e^{-ir\delta s/\varepsilon} - C_2(\delta, \varepsilon)e^{ir\delta s/\varepsilon} \\ C_1(\delta, \varepsilon)e^{-ir\delta s/\varepsilon} + C_2(\delta, \varepsilon)e^{ir\delta s/\varepsilon} \end{pmatrix} & \text{si } \delta/\varepsilon \rightarrow +\infty \end{cases}$$

où $C_k(\delta, \varepsilon)$ sont choisis en $O(1)$ et si on note $\psi(t, \delta, \varepsilon)$ la solution de (1.1) de condition initiale $\psi(0, \delta, \varepsilon) = \psi_I(0, \delta, \varepsilon)$, alors il existe une constante strictement positive C telle que

$$\sup_{t \in [-t_i, t_i]} \|\psi(t, \delta, \varepsilon) - \psi_I(t, \delta, \varepsilon)\| \leq \begin{cases} C \left(t_i + \frac{t_i^3}{\varepsilon^2} + \frac{t_i \delta}{\varepsilon^2} \right) & \text{si } \delta/\varepsilon \rightarrow 0 \\ C \left(t_i + \frac{t_i^3}{\varepsilon^2} \right) & \text{si } \delta = \varepsilon \\ C \left(\frac{t_i^2}{\varepsilon^2} + \frac{t_i \delta^2}{\varepsilon^2} \right) & \text{si } \delta/\varepsilon \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (1.11)$$

De plus, avec

$$\begin{aligned} f_1(s, \delta, \varepsilon) &= e^{-i\frac{rs^2}{2}} \left[C_1(\delta, \varepsilon) + \frac{\delta}{\varepsilon} \left(D_1(\delta, \varepsilon) - irC_2(\delta, \varepsilon) \int_{-\infty}^s e^{ir\sigma^2} d\sigma \right) \right] \\ f_2(s, \delta, \varepsilon) &= e^{i\frac{rs^2}{2}} \left[C_2(\delta, \varepsilon) + \frac{\delta}{\varepsilon} \left(D_2(\delta, \varepsilon) + irC_1(\delta, \varepsilon) \int_{-\infty}^s e^{-ir\sigma^2} d\sigma \right) \right] \end{aligned}$$

si $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$ et

$$\begin{aligned} f_1(s, \delta, \varepsilon) + f_2(s, \delta, \varepsilon) &= \\ \sqrt{2}e^{-ir\frac{\delta}{\varepsilon}s} \left[C_1(\delta, \varepsilon) + \frac{\varepsilon}{\delta} \left(D_1(\delta, \varepsilon) + \frac{1}{2}C_2(\delta, \varepsilon)e^{2ir\frac{\delta}{\varepsilon}s} \left[1 - e^{-ir\frac{\delta}{\varepsilon}s} \frac{\sin\left(r\frac{\delta}{\varepsilon}s\right)}{r\frac{\delta}{\varepsilon}s} \right] \right) \right] \\ f_2(s, \delta, \varepsilon) - f_1(s, \delta, \varepsilon) &= \\ \sqrt{2}e^{ir\frac{\delta}{\varepsilon}s} \left[C_2(\delta, \varepsilon) + \frac{\varepsilon}{\delta} \left(D_2(\delta, \varepsilon) - \frac{1}{2}C_1(\delta, \varepsilon)e^{-2ir\frac{\delta}{\varepsilon}s} \left[1 - e^{ir\frac{\delta}{\varepsilon}s} \frac{\sin\left(r\frac{\delta}{\varepsilon}s\right)}{r\frac{\delta}{\varepsilon}s} \right] \right) \right] \end{aligned}$$

si $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$, où $C_k(\delta, \varepsilon)$ et $D_k(\delta, \varepsilon)$ sont choisis en $O(1)$, on a (1.11) avec pour second membre

$$\begin{cases} C \left(t_i + \frac{t_i^3}{\varepsilon^2} + \frac{t_i \delta^2}{\varepsilon^3} \right) & \text{si } \delta/\varepsilon \rightarrow 0 \\ C \left(\frac{t_i^2}{\delta} + \frac{t_i^2 \delta}{\varepsilon^2} + \frac{t_i^3}{\delta \varepsilon^2} + \frac{t_i \delta^2}{\varepsilon^2} \right) & \text{si } \delta/\varepsilon \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

Remarque 1.6 Le temps t_i est ici encore indépendant de δ et ε .

1.7.2 Preuve du domaine de validité du Lemme 1.6

On effectue un changement d'échelle de temps $s = t/\varepsilon$. L'équation (1.1) devient alors

$$i\varepsilon \frac{\partial}{\partial s} \psi = H(\varepsilon s, \delta) \psi,$$

dans laquelle on injecte l'Ansatz

$$\psi_I(t, \delta, \varepsilon) = \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \delta) d\tau\right) \sum_{k=1,2} f_k\left(\frac{t}{\varepsilon}, \delta, \varepsilon\right) \psi_k(t, \delta).$$

L'erreur commise $\zeta_I(s, \delta, \varepsilon) = [i\varepsilon \frac{\partial}{\partial s} - H(\varepsilon s, \delta)] \psi_I(\varepsilon s, \delta, \varepsilon)$ vérifie alors

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^{\varepsilon s} E(\tau, \delta) d\tau\right) \zeta_I(s, \delta, \varepsilon) = \\ \sum_{k=1,2} \left[i\varepsilon \frac{\partial f_k}{\partial s}(s, \delta, \varepsilon) \psi_k(\varepsilon s, \delta) - f_k(s, \delta, \varepsilon) H_0(\varepsilon s, \delta) \psi_k(\varepsilon s, \delta) \right] \\ + i\varepsilon^2 \sum_{k=1,2} f_k(s, \delta, \varepsilon) \frac{\partial \psi_k}{\partial t}(\varepsilon s, \delta) \end{aligned}$$

où $H_0(t, \delta)$ est défini dans (1.5).

Le premier terme donne déjà lieu à une erreur consistante, on va donc chercher à le faire disparaître au mieux par un choix judicieux des f_k , *i.e.* résoudre de manière approchée

$$i\varepsilon \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b(\varepsilon s, \delta) & (c + id)(\varepsilon s, \delta) \\ (c - id)(\varepsilon s, \delta) & -b(\varepsilon s, \delta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}.$$

La première erreur commise en ne traitant pas le terme restant est alors en $O(\varepsilon^2 |f_k|)$.

Compte tenu des asymptotiques de b , c et d , on est ramené à l'équation

$$i\varepsilon \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} \varepsilon s & \delta \\ \delta & -\varepsilon s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

La seconde erreur est alors en $O((\varepsilon^2 s^2 + \delta^2) |f_k|)$.

On distingue alors trois situations

1. $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$ et on est ramené au système

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} s & 0 \\ 0 & -s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}, \quad (1.13)$$

qu'on résout en

$$\begin{aligned} f_1(s, \delta, \varepsilon) &= C_1(\delta, \varepsilon) e^{-i \frac{rs^2}{2}} \\ f_2(s, \delta, \varepsilon) &= C_2(\delta, \varepsilon) e^{i \frac{rs^2}{2}} \end{aligned}$$

ce qui conduit à une erreur supplémentaire en $O(\delta |f_k|)$; pour le premier ordre, on cherche les f_k sous la forme d'une série asymptotique en $\frac{\delta}{\varepsilon}$

$$f_k(s, \delta, \varepsilon) = f_k^0(s, \delta, \varepsilon) + \frac{\delta}{\varepsilon} f_k^1(s, \delta, \varepsilon) + \dots$$

ainsi les f_k^0 vérifie (1.13) à l'ordre dominant et au premier ordre, on doit résoudre

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1^1 \\ f_2^1 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} s & 0 \\ 0 & -s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1^1 \\ f_2^1 \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1^0 \\ f_2^0 \end{pmatrix}$$

autrement dit

$$\frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} e^{i \frac{rs^2}{2}} f_1^1 \\ e^{-i \frac{rs^2}{2}} f_2^1 \end{pmatrix} = -ir \begin{pmatrix} e^{i \frac{rs^2}{2}} f_2^0 \\ e^{-i \frac{rs^2}{2}} f_1^0 \end{pmatrix};$$

en s'arrêtant à ce premier ordre, on trouve l'Ansatz de l'énoncé et l'erreur supplémentaire est alors en $O\left(\frac{\delta^2}{\varepsilon} |f_k^1|\right)$;

2. $\delta = \varepsilon$ et on est ramené de manière exacte au système

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} s & 1 \\ 1 & -s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix},$$

qu'on résout exactement à l'aide des fonctions paraboliques cylindriques $D_n(z)$ (cf. [WhittWatson27])

$$\begin{aligned} f_1(s, \delta = \varepsilon, \varepsilon) &= \left(C_1(\varepsilon) D_{-\frac{ir}{2}} + C_2(\varepsilon) \frac{1-i}{2} \sqrt{r} D_{\frac{ir}{2}-1} \right) (-(1+i)\sqrt{r}s) \\ f_2(s, \delta = \varepsilon, \varepsilon) &= \left(-C_1(\varepsilon) \frac{1+i}{2} \sqrt{r} D_{-\frac{ir}{2}-1} + C_2(\varepsilon) D_{\frac{ir}{2}} \right) (-(1+i)\sqrt{r}s); \end{aligned}$$

3. $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$ et on est ramené au système

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\varepsilon} \\ \frac{\delta}{\varepsilon} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

qu'on résout en

$$\begin{aligned} f_1(s, \delta, \varepsilon) + f_2(s, \delta, \varepsilon) &= \sqrt{2} C_1(\delta, \varepsilon) e^{-i \frac{r\delta s}{\varepsilon}} \\ -f_1(s, \delta, \varepsilon) + f_2(s, \delta, \varepsilon) &= \sqrt{2} C_2(\delta, \varepsilon) e^{i \frac{r\delta s}{\varepsilon}} \end{aligned}$$

ce qui conduit à une erreur supplémentaire en $O(\varepsilon|s| \cdot |f_k|)$; pour le premier ordre, on cherche les f_k sous la forme d'une série asymptotique en $\frac{\varepsilon}{\delta}$

$$f_k(s, \delta, \varepsilon) = f_k^0(s, \delta, \varepsilon) + \frac{\varepsilon}{\delta} f_k^1(s, \delta, \varepsilon) + \dots$$

ainsi les f_k^0 vérifient (1.14) à l'ordre dominant et au premier ordre, on doit résoudre

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1^1 \\ f_2^1 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\varepsilon} \\ \frac{\delta}{\varepsilon} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1^1 \\ f_2^1 \end{pmatrix} + r \frac{\delta}{\varepsilon} \begin{pmatrix} s & 0 \\ 0 & -s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1^0 \\ f_2^0 \end{pmatrix}$$

autrement dit

$$\frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} e^{i \frac{r\delta s}{\varepsilon}} (f_1^1 + f_2^1) \\ e^{-i \frac{r\delta s}{\varepsilon}} (-f_1^1 + f_2^1) \end{pmatrix} = ir \frac{\delta}{\varepsilon} s \begin{pmatrix} e^{i \frac{r\delta s}{\varepsilon}} (-f_1^0 + f_2^0) \\ e^{-i \frac{r\delta s}{\varepsilon}} (f_1^0 + f_2^0) \end{pmatrix};$$

en s'arrêtant à ce premier ordre, on trouve l'Ansatz de l'énoncé et l'erreur supplémentaire est alors en $O(\frac{\varepsilon}{\delta} \varepsilon |s| \cdot |f_k^1|)$;

Dans tous les cas, on a $|f_k| = O(C_k)$ à l'ordre dominant, on applique alors le Lemme 1.3 en calculant explicitement l'intégrale temporelle du majorant.

Pour le premier ordre, on utilise simplement que $|f_k^1| = O(|C_k| + |D_k|)$ si $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$ et $|f_k^1| = O(|D_k| + |C_k|(1 + |s|))$ si $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$. \square

1.8 Recollement des trois solutions

Abordons maintenant le dernier ingrédient qui va nous permettre de démontrer le Théorème 1.4. On va chercher à relier les Lemmes 1.5 et 1.6 pour savoir à quelle solution, dans la région sortante, correspond le choix $\Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon) = 0$, $\Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon) = 1$ dans la région entrante.

1.8.1 Lemme de recollement

Le lemme suivant permet de montrer que, si on dispose de deux solutions approchées (dans la limite $\hbar \rightarrow 0$) de l'équation de Schrödinger (1.4) associées à deux conditions initiales différentes en deux temps différents, valables pour des intervalles de temps qui s'intersectent en au moins un point et si elles sont suffisamment proches l'une de l'autre en ce point, alors on peut altérer l'une des deux conditions initiales de façon à ce que nos deux solutions approchées se recollent pour approcher la même solution sur la réunion des deux intervalles de temps où elles sont définies (cf. Figure 1.4).

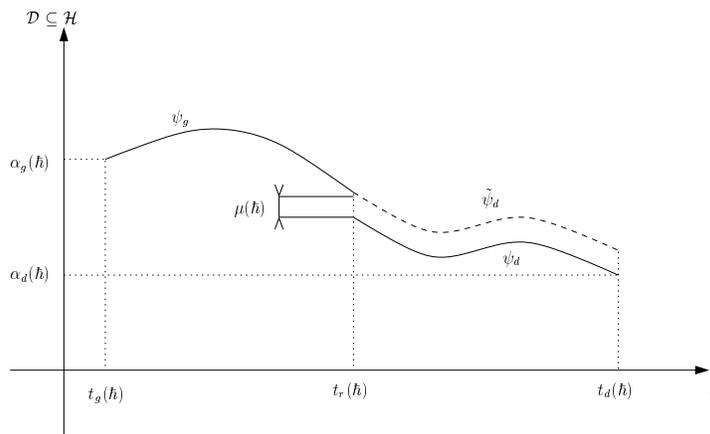


FIG. 1.4 – Recollement de deux solutions.

Lemme 1.7 Soit $H(r, \hbar)$ une famille d'opérateurs autoadjoints sur un espace de Hilbert séparable \mathcal{H} de domaine fixe (indépendant de r et \hbar) \mathcal{D} . On se donne trois temps $t_g(\hbar) < t_r(\hbar) < t_d(\hbar)$ et deux conditions initiales $\alpha_g(\hbar)$ et $\alpha_d(\hbar)$ dans \mathcal{D} . On considère les solutions $\psi_*(r, \hbar)$ de l'équation de Schrödinger (1.4) de condition initiale $\alpha_*(\hbar)$ en $t_*(\hbar)$ pour $* = g, d$ et on suppose qu'on a

$$\|\psi_g(t_r(\hbar), \hbar) - \psi_d(t_r(\hbar), \hbar)\| \leq \mu(\hbar).$$

Alors il existe un vecteur $\beta(\hbar)$ dans \mathcal{D} tel que, si $\tilde{\psi}_d(r, \hbar)$ désigne la solution de (1.4) de condition initiale $\alpha_d(\hbar) + \beta(\hbar)$ en $t_d(\hbar)$, on a

- $\psi_g(r, \hbar) = \tilde{\psi}_d(r, \hbar)$ pour tout r dans $[t_g(\hbar), t_d(\hbar)]$ et
- $\|\beta(\hbar)\| \leq \mu(\hbar)$.

Remarque 1.7 Le lemme reste valable si l'hamiltonien, les trois temps, les condition initiales, le majorant μ dépendent d'un paramètre supplémentaire δ comme c'est le cas dans ce qui suit.

Preuve On a toujours l'existence d'un propagateur unitaire $U(r, r_0, \hbar)$. Ainsi les solutions gauche et droites sont données par

$$\begin{aligned} \psi_g(r, \hbar) &= U(r, t_g(\hbar), \hbar)\alpha_g(\hbar) \\ \psi_d(r, \hbar) &= U(r, t_d(\hbar), \hbar)\alpha_d(\hbar) \\ \tilde{\psi}_d(r, \hbar) &= \psi_d(r, \hbar) + U(r, t_d(\hbar), \hbar)\beta(\hbar). \end{aligned}$$

Il suffit alors de prendre $\beta(\hbar) = U(t_d(\hbar), t_r(\hbar), \hbar)[\psi_g(t_r(\hbar), \hbar) - \psi_d(t_r(\hbar), \hbar)]$ qui convient grâce au caractère unitaire du propagateur. \square

1.8.2 Asymptotique des vecteurs propres dans deux régimes asymptotiques

Suivant le régime dans lequel on se place ($|t|/\delta \rightarrow 0, +\infty$) on dispose de deux asymptotiques bien distinctes qui nous serviront suivant que le paramètre δ tend vers 0 plus vite ou moins vite que le paramètre adiabatique ε .

Premier régime : $|t|/\delta \rightarrow +\infty$

C'est le régime qu'on utilisera quand $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$: on s'approche "adiabatiquement" de la zone de transition éventuelle moins vite que le "gap" ne se comble ainsi, heuristiquement, quand on arrive dans la zone de transition, le "gap" est nul et la transition est totale.

Lemme 1.8 *Quand δ et t tendent vers 0, on a, pour $t < 0$,*

$$\|\Phi_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) - \psi_2(t, \delta)\| = O\left(|t| + \left|\frac{\delta}{t}\right|\right)$$

$$\|\Phi_{\mathcal{B}}^-(t, \delta) + \psi_1(t, \delta)\| = O\left(|t| + \left|\frac{\delta}{t}\right|\right),$$

et pour $t > 0$,

$$\|\Phi_{\mathcal{A}}^+(t, \delta) - \psi_1(t, \delta)\| = O\left(|t| + \left|\frac{\delta}{t}\right|\right)$$

$$\|\Phi_{\mathcal{B}}^+(t, \delta) - \psi_2(t, \delta)\| = O\left(|t| + \left|\frac{\delta}{t}\right|\right),$$

uniformément en $|\delta/t| \leq M$.

Preuve On a

$$|\rho(t, \delta) - r|t|| = \frac{|\rho(t, \delta)^2 - r^2 t^2|}{\rho(t, \delta) + r|t|} \leq \frac{r^2 \delta^2 + C_\rho(t^2 + \delta^2)^{3/2}}{r|t|}.$$

$$\begin{aligned} |B(t, \delta) - \operatorname{sgn}(t)| &= \left| \frac{b(t, \delta) - \operatorname{sgn}(t)\rho(t, \delta)}{\rho(t, \delta)} \right| \\ &\leq \frac{|b(t, \delta) - r|t| + |\rho(t, \delta) - r|t||}{\frac{r}{2}|t|} \\ &\leq 2 \frac{rC_b|t|(t^2 + \delta^2) + r^2 \delta^2 + C_\rho(t^2 + \delta^2)^{3/2}}{r^2 t^2} \end{aligned}$$

soit finalement

$$B(t, \delta) = \operatorname{sgn}(t) + O\left(|t| + \frac{\delta^2}{t^2}\right).$$

Par ailleurs

$$|A(t, \delta)| = \left| \frac{c(t, \delta) + id(t, \delta)}{\rho(t, \delta)} \right| \leq \frac{r\delta + (C_c + C_d)(t^2 + \delta^2)}{\frac{r}{2}|t|}$$

soit finalement

$$A(t, \delta) = O\left(|t| + \left|\frac{\delta}{t}\right|\right)$$

ce qui permet de conclure. \square

Deuxième régime : $|t|/\delta \rightarrow 0$

C'est le régime qu'on utilisera quand $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$: on s'approche "adiabatiquement" de la zone de transition éventuelle plus vite que le "gap" ne se comble ainsi, heuristiquement, quand le "gap" devient nul, on est déjà trop avancé dans la zone de transition pour que la transition ait lieu.

Lemme 1.9 *Quand δ et t tendent vers 0, on a, pour $t < 0$,*

$$\left\| \Phi_{\mathcal{A}}^-(t, \delta) - \frac{\sqrt{2}}{2}(\psi_1(t, \delta) + \psi_2(t, \delta)) \right\| = O\left(\delta + \left|\frac{t}{\delta}\right|\right)$$

$$\left\| \Phi_{\mathcal{B}}^-(t, \delta) - \frac{\sqrt{2}}{2}(-\psi_1(t, \delta) + \psi_2(t, \delta)) \right\| = O\left(\delta + \left|\frac{t}{\delta}\right|\right),$$

et pour $t > 0$,

$$\left\| \Phi_{\mathcal{A}}^+(t, \delta) - \frac{\sqrt{2}}{2}(\psi_1(t, \delta) + \psi_2(t, \delta)) \right\| = O\left(\delta + \left|\frac{t}{\delta}\right|\right)$$

$$\left\| \Phi_{\mathcal{B}}^+(t, \delta) - \frac{\sqrt{2}}{2}(-\psi_1(t, \delta) + \psi_2(t, \delta)) \right\| = O\left(\delta + \left|\frac{t}{\delta}\right|\right),$$

uniformément en $|t/\delta| \leq M$.

Preuve On a

$$|\rho(t, \delta) - r\delta| = \frac{|\rho(t, \delta)^2 - r^2\delta^2|}{\rho(t, \delta) + r\delta} \leq \frac{r^2t^2 + C_\rho(t^2 + \delta^2)^{3/2}}{r\delta}$$

$$\begin{aligned} |A(t, \delta) - 1| &= \left| \frac{c(t, \delta) + id(t, \delta) - \rho(t, \delta)}{\rho(t, \delta)} \right| \\ &\leq \frac{|c(t, \delta) + id(t, \delta) - r\delta| + |\rho(t, \delta) - r\delta|}{\frac{r}{2}\delta} \\ &\leq \frac{2(C_c + C_d)r\delta(t^2 + \delta^2) + r^2t^2 + C_\rho(t^2 + \delta^2)^{3/2}}{r^2\delta^2} \end{aligned}$$

soit finalement

$$A(t, \delta) = 1 + O\left(\delta + \frac{t^2}{\delta^2}\right).$$

Par ailleurs,

$$|B(t, \delta)| = \left| \frac{b(t, \delta)}{\rho(t, \delta)} \right| \leq \frac{r|t| + C_b(t^2 + \delta^2)}{\frac{r}{2}\delta}$$

soit finalement

$$B(t, \delta) = O\left(\delta + \left|\frac{t}{\delta}\right|\right)$$

ce qui permet de conclure. \square

1.8.3 Le presque croisement étroit ($\delta/\varepsilon \rightarrow 0$) : régime $|t|/\delta \rightarrow +\infty$.

On a

$$\begin{aligned} \int_0^t \rho(\tau, \delta) d\tau &= r \left[\frac{t}{2} \sqrt{t^2 + \delta^2} + \frac{\delta^2}{2} \ln \left(t + \sqrt{t^2 + \delta^2} \right) - \frac{\delta^2}{2} \ln \delta \right] + O(|t|^3 + |t|\delta^2) \\ &= \operatorname{sgn}(t)r \left(\frac{t^2}{2} + \frac{\delta^2}{2} \ln \left| \frac{t}{\delta} \right| \right) + O(|t|^3 + \delta^2). \end{aligned}$$

D'où, en combinant avec les Lemmes 1.8 et 1.5, pour $t < 0$

$$\begin{aligned} \psi_E(t, \delta, \varepsilon) &= \exp \left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E_B(\tau, \delta) d\tau \right) \underline{\Phi}_B^-(t, \delta) \\ &= -\exp \left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \delta) d\tau \right) \exp \left(-i \frac{rt^2}{2\varepsilon^2} \right) \exp(i\omega_B^-(t, \delta)) \psi_1(t, \delta) \\ &\quad \times [1 + O(e_\phi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \delta, \varepsilon))] \end{aligned}$$

où

$$e_\phi(t, \delta, \varepsilon) = \frac{\delta^2}{\varepsilon^2} \ln \left| \frac{t}{\delta} \right| + \frac{|t|^3}{\varepsilon^2} + \frac{\delta^2}{\varepsilon^2}, \quad e_\Phi(t, \delta) = |t| + \left| \frac{\delta}{t} \right|, \quad e_E(t, \delta, \varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{t^2}$$

sont les erreurs commises sur, respectivement, la phase, le vecteur propre $\underline{\Phi}_B^-(t, \delta)$ et la solution approchée globale. De même, par le Lemme 1.6, on a

$$\begin{aligned} \psi_I(t, \delta, \varepsilon) &= \exp \left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \delta) d\tau \right) \\ &\quad \times \sum_{k=1,2} C_k(\delta, \varepsilon) \exp \left((-1)^k i \frac{rt^2}{2\varepsilon^2} \right) \psi_k(t, \delta) [1 + O(e_I(t, \delta, \varepsilon))] \end{aligned}$$

où $e_I(t, \delta, \varepsilon) = \frac{|t|^3}{\varepsilon^2} + \frac{|t|\delta}{\varepsilon^2}$ est l'erreur commise sur la solution approchée globale. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent à

$$O(e_\phi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \delta, \varepsilon) + e_I(t, \delta, \varepsilon)) \quad (1.15)$$

près à condition de choisir

$$\begin{aligned} C_1(\delta, \varepsilon) &= -e^{i\omega_B^-(-t_r(\delta, \varepsilon), \delta)} \\ C_2(\delta, \varepsilon) &= 0. \end{aligned}$$

De manière analogue, on a, pour $t > 0$

$$\begin{aligned} \psi_S(t, \delta, \varepsilon) &= \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \exp \left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E_{\mathcal{C}}(\tau, \delta) d\tau \right) \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-(t, \delta) \\ &= \exp \left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \delta) d\tau \right) [1 + O(e_\phi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \delta, \varepsilon))] \\ &\quad \times \sum_{(\mathcal{C}, k)=(\mathcal{A}, 1), (\mathcal{B}, 2)} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \exp \left((-1)^k i \frac{rt^2}{2\varepsilon^2} \right) \exp(i\omega_{\mathcal{C}}^+(t, \delta)) \psi_k(t, \delta). \end{aligned}$$

Il est possible de recoller les deux dernières solutions avec toujours l'erreur (1.15) à condition de choisir

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) &= -e^{i[\omega_B^-(-t_r(\delta, \varepsilon), \delta) - \omega_{\mathcal{A}}^+(t_r(\delta, \varepsilon), \delta)]} \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) &= 0. \end{aligned}$$

L'erreur commise est alors en $o(1)$ si on peut choisir $t = t_r(\delta, \varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$\varepsilon \ll t \ll \varepsilon^{2/3}, \frac{\varepsilon^2}{\delta}$$

qui est bien une zone non vide.

Pour le recollement au premier ordre, on choisit

$$\begin{aligned} C_1(\delta, \varepsilon) &= -e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), \delta)} \\ C_2(\delta, \varepsilon) &= 0 \\ D_1(\delta, \varepsilon) &= 0 \\ D_2(\delta, \varepsilon) &= 0, \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) &= -e^{i[\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), \delta) - \omega_{\mathcal{A}}^+(t_r(\delta, \varepsilon), \delta)]} \sqrt{1 - |\Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon)|^2} \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) &= -\frac{\delta}{\varepsilon} \sqrt{\pi r} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{i[\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), \delta) - \omega_{\mathcal{B}}^+(t_r(\delta, \varepsilon), \delta)]}. \end{aligned}$$

L'erreur commise est alors en $o\left(\frac{\delta}{\varepsilon}\right)$ si on peut choisir $t = t_r(\delta, \varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$\frac{\varepsilon^{3/2}}{\delta^{1/2}}, \varepsilon \ll t \ll (\delta\varepsilon)^{1/3}, \frac{\varepsilon^2}{\delta}, \frac{\delta}{\varepsilon}$$

qui est bien une zone non vide si on dispose de la condition technique supplémentaire $\delta/\varepsilon^{7/5} \rightarrow +\infty$.

1.8.4 Le presque croisement critique ($\delta = \varepsilon$) : régime $|t|/\varepsilon \rightarrow +\infty$.

On complète ici les calculs effectués par Hagedorn dans [Hagedorn91] pour le cas réel symétrique. On a

$$\int_0^t \rho(\tau, \varepsilon) d\tau = \operatorname{sgn}(t)r \left[\frac{t^2}{2} + \frac{\varepsilon^2}{2} \ln \left| \frac{t}{\varepsilon} \right| + \frac{\varepsilon^2}{4} (1 + 2 \ln 2) \right] + O\left(\frac{\varepsilon^4}{t^2} + |t|^3 + |t|\varepsilon^2 \right).$$

D'où, en combinant avec les Lemmes 1.9 et 1.5, pour $t < 0$

$$\begin{aligned} \psi_E(t, \varepsilon) &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E_{\mathcal{B}}(\tau, \delta) d\tau\right) \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-(t, \varepsilon) \\ &= -\exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \varepsilon) d\tau\right) [1 + O(e_{\phi}(t, \varepsilon) + e_{\Phi}(t, \varepsilon) + e_E(t, \varepsilon))] \\ &\quad \times \exp\left(-i\frac{rt^2}{2\varepsilon^2} - i\frac{r}{2} \ln \left| \frac{t}{\varepsilon} \right| - i\frac{r}{4} (1 + 2 \ln 2)\right) \exp(i\omega_{\mathcal{B}}^-(t, \delta)) \psi_1(t, \varepsilon) \end{aligned}$$

où

$$e_{\phi}(t, \varepsilon) = |t| + \frac{\varepsilon^2}{t^2} + \frac{|t|^3}{\varepsilon^2}, \quad e_{\Phi}(t, \varepsilon) = |t| + \left| \frac{\varepsilon}{t} \right|, \quad e_E(t, \varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{t^2}$$

¹Cette notation signifie que $\varepsilon/t_r(\delta, \varepsilon)$, $t_r(\delta, \varepsilon)/\varepsilon^{2/3}$ et $t_r(\delta, \varepsilon)\delta/\varepsilon^2$ tendent vers 0 quand ε et δ/ε tendent vers 0.

sont les erreurs commises sur, respectivement, la phase, le vecteur propre $\Phi_{\mathcal{B}}^-(t, \delta)$ et la solution approchée globale. De même, par le Lemme 1.6 et un développement asymptotique des fonctions paraboliques cylindriques, on a, pour $t < 0$,

$$\begin{aligned} \psi_I(t, \varepsilon) &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \varepsilon) d\tau\right) [1 + O(e_I(t, \varepsilon) + e_D(t, \varepsilon))] \\ &\times \exp\left(-i \frac{rt^2}{2\varepsilon^2}\right) \sum_{k=1,2} C_k(\varepsilon) \exp\left((-1)^k i \left(\frac{r}{4} \ln(2r) - \frac{\pi r}{8} + \frac{r}{2} \ln \left|\frac{t}{\varepsilon}\right|\right)\right) \psi_k(t, \varepsilon) \end{aligned}$$

où $e_I(t, \varepsilon) = |t| + \frac{|t|^3}{\varepsilon^2}$ correspond à l'erreur commise sur la solution approchée globale et $e_D(t, \varepsilon) = \left|\frac{\varepsilon}{t}\right|$ à celle commise sur l'asymptotique des fonctions paraboliques cylindriques. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent à

$$O(e_\phi(t, \varepsilon) + e_\Phi(t, \varepsilon) + e_E(t, \varepsilon) + e_I(t, \varepsilon) + e_D(t, \varepsilon)) \quad (1.16)$$

près à condition de choisir

$$\begin{aligned} C_1(\varepsilon) &= e^{\frac{\pi r}{8}} e^{-i\frac{r}{4}(1-\ln \frac{r}{2})} e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(t_r(\varepsilon), \varepsilon)} \\ C_2(\varepsilon) &= 0. \end{aligned}$$

De manière analogue, on a, pour $t > 0$

$$\begin{aligned} \psi_I(t, \varepsilon) &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \varepsilon) d\tau\right) [1 + O(e_I(t, \varepsilon) + e_D(t, \varepsilon))] \\ &\times C_1(\varepsilon) \sum_{k=1,2} \lambda_k \exp\left((-1)^k \left(i\frac{r}{4} \ln(2r) + i\frac{r}{2} \ln \left|\frac{t}{\varepsilon}\right| + i\frac{rt^2}{2\varepsilon^2}\right)\right) \psi_k(t, \varepsilon) \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= e^{-\frac{3\pi r}{8}} \\ \lambda_2 &= -e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{\sqrt{\pi r}}{\Gamma(1 + i\frac{r}{2})} e^{-\frac{\pi r}{8}} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \psi_S(t, \varepsilon) &= \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E_{\mathcal{C}}(\tau, \varepsilon) d\tau\right) \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, \varepsilon) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \varepsilon) d\tau\right) [1 + O(e_\phi(t, \varepsilon) + e_\Phi(t, \varepsilon) + e_E(t, \varepsilon))] \\ &\times \sum_{(\mathcal{C}, k)=(\mathcal{A}, 1), (\mathcal{B}, 2)} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \exp\left[(-1)^k i \left(\frac{rt^2}{2\varepsilon^2} + \frac{r}{2} \ln \left|\frac{t}{\varepsilon}\right| + \frac{r}{4}(1 + 2 \ln 2)\right)\right] e^{i\omega_{\mathcal{C}}^+(t, \varepsilon)} \psi_k(t, \varepsilon). \end{aligned}$$

Il est possible de recoller les deux dernières solutions avec toujours l'erreur (1.16) à condition de choisir

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) &= e^{-\frac{\pi r}{2}} e^{i(\omega_{\mathcal{B}}^-(t_r(\varepsilon), \varepsilon) - \omega_{\mathcal{A}}^+(t_r(\varepsilon), \varepsilon))} \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) &= -e^{-\frac{\pi r}{4}} e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{\sqrt{\pi r}}{\Gamma(1 + i\frac{r}{2})} e^{-i\frac{r}{2}(1-\ln \frac{r}{2})} e^{i(\omega_{\mathcal{B}}^-(t_r(\varepsilon), \varepsilon) - \omega_{\mathcal{B}}^+(t_r(\varepsilon), \varepsilon))}. \end{aligned}$$

L'erreur commise est alors en $o(1)$ si on peut choisir $t = t_r(\varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$\varepsilon \ll t \ll \varepsilon^{2/3}$$

qui est bien une zone non vide. Plus précisément, l'erreur est en $O(\varepsilon^{1/4})$ si on choisit $t_r(\varepsilon) = \varepsilon^{3/4}$.

1.8.5 Le presque croisement large ($\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$) : régime $|t|/\delta \rightarrow 0$.

On a

$$\int_0^t \rho(\tau, \delta) d\tau = rt\delta + O\left(\frac{t^4}{\delta^2}\right).$$

D'où, en combinant avec les Lemmes 1.9 et 1.5, pour $t < 0$

$$\begin{aligned} \psi_E(t, \delta, \varepsilon) &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E_{\mathcal{B}}(\tau, \delta) d\tau\right) \underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-(t, \delta) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \delta) d\tau\right) [1 + O(e_\phi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \delta, \varepsilon))] \\ &\quad \times \exp\left(\frac{rt\delta}{\varepsilon^2}\right) \exp(i\omega_{\mathcal{B}}^-(t, \delta)) \frac{\sqrt{2}}{2} [-\psi_1(t, \delta) + \psi_2(t, \delta)] \end{aligned}$$

où

$$e_\phi(t, \delta, \varepsilon) = \frac{t^4}{\delta^2 \varepsilon^2}, \quad e_\Phi(t, \delta) = \delta + \left|\frac{t}{\delta}\right|, \quad e_E(t, \delta, \varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{\delta^2}$$

sont les erreurs commises sur, respectivement, la phase, le vecteur propre $\underline{\Phi}_{\mathcal{B}}^-(t, \delta)$ et la solution approchée globale. De même, par le Lemme 1.6, on a

$$\begin{aligned} \psi_I(t, \delta, \varepsilon) &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \delta) d\tau\right) [1 + O(e_I(\varepsilon s, \delta, \varepsilon))] \\ &\quad \times \left[C_1(\delta, \varepsilon) e^{-ir\frac{\delta t}{\varepsilon^2}} \frac{\sqrt{2}}{2} (\psi_1(t, \delta) + \psi_2(t, \delta)) + C_2(\delta, \varepsilon) e^{ir\frac{\delta t}{\varepsilon^2}} \frac{\sqrt{2}}{2} (-\psi_1(t, \delta) + \psi_2(t, \delta)) \right] \end{aligned}$$

où $e_I(t, \delta, \varepsilon) = \frac{t^2}{\varepsilon^2} + \frac{|t|\delta^2}{\varepsilon^2}$ est l'erreur commise sur la solution approchée globale. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent à

$$O(e_\phi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \delta, \varepsilon) + e_I(t, \delta, \varepsilon)) \quad (1.17)$$

près à condition de choisir

$$\begin{aligned} C_1(\delta, \varepsilon) &= 0 \\ C_2(\delta, \varepsilon) &= e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), \delta)}. \end{aligned}$$

De manière analogue, on a, pour $t > 0$

$$\begin{aligned} \psi_S(t, \delta, \varepsilon) &= \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E_{\mathcal{C}}(\tau, \delta) d\tau\right) \underline{\Phi}_{\mathcal{C}}^-(t, \delta) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2} \int_0^t E(\tau, \delta) d\tau\right) [1 + O(e_\phi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \delta, \varepsilon))] \\ &\quad \times \sum_{(\mathcal{C}, k)=(\mathcal{A}, 1), (\mathcal{B}, 2)} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) e^{(-1)^k ir\frac{\delta t}{\varepsilon^2}} e^{i\omega_{\mathcal{C}}^+(t, \delta)} \frac{\sqrt{2}}{2} \left((-1)^{k-1} \psi_1(t, \delta) + \psi_2(t, \delta) \right). \end{aligned}$$

Il est possible de recoller les deux dernières solutions avec toujours l'erreur (1.17) à condition de choisir

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) &= 0 \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) &= e^{i[\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), \delta) - \omega_{\mathcal{B}}^+(t_r(\delta, \varepsilon), \delta)]}. \end{aligned}$$

L'erreur commise est alors en $o(1)$ si on peut choisir $t = t_r(\delta, \varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$t \ll 2\varepsilon, \frac{\varepsilon^2}{\delta^2}$$

²Cette notation signifie que $t_r(\delta, \varepsilon)/\varepsilon$ et $t_r(\delta, \varepsilon)\delta^2/\varepsilon^2$ tendent vers 0 quand δ et ε/δ tendent vers 0.

qui est bien une zone non vide.

Pour le recollement au premier ordre, on choisit

$$\begin{aligned} C_1(\delta, \varepsilon) &= 0 \\ C_2(\delta, \varepsilon) &= e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), \delta)} \\ D_1(\delta, \varepsilon) &= 0 \\ D_2(\delta, \varepsilon) &= 0, \end{aligned}$$

et les $\Lambda_{\mathcal{C}}^+$ sont inchangés (il n'y a pas de terme correctif supplémentaire puisque d'après les formules du Lemme 1.6 ceux-ci sont d'ordre $O\left(\frac{t}{\delta}\right)$ qui est négligeable). L'erreur commise est alors en $o\left(\frac{\varepsilon}{\delta}\right)$ si on peut choisir $t = t_r(\delta, \varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$t \ll \varepsilon, \frac{\varepsilon^3}{\delta^3}, \frac{\varepsilon^{3/2}}{\delta}$$

qui est bien une zone non vide et si on dispose de la condition supplémentaire $\delta/\varepsilon^{1/2} \rightarrow 0$ (cette condition provient du terme en δ dans $e_{\Phi}(t, \delta)$ et donc de la méconnaissance de la matrice au second ordre). On notera d'ailleurs que dans ce cadre purement adiabatique, on peut choisir le temps de recollement aussi proche de 0 que l'on veut ce qui ne sera pas le cas dans le cadre Born-Oppenheimer compte tenu de la largeur caractéristique des paquets d'onde gaussien (cf. Section 4.9.4). \square

Chapitre 2

Autoadjonction et localisation du spectre essentiel

Introduction

Ce second chapitre est consacré à une étude un peu théorique d'opérateurs typiques de l'approximation de Born-Oppenheimer

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta_x + h(x)$$

où $h(x)$ est une famille d'opérateurs autoadjoints (éventuellement non bornés) de domaine fixe \mathcal{D} (dans un espace de Hilbert séparable \mathcal{H}) suffisamment régulier en x dans Ω ouvert de \mathbb{R}^d .

Il est classique que si \mathcal{H} est de dimension 1 et

- si $h(x)$ est localement intégrable et uniformément bornée inférieurement, alors H_h est essentiellement autoadjoint sur $C_c^\infty(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$,
- si de plus $h(x)$ admet des limites inférieures c_\pm respectivement en $\pm\infty$, alors le spectre essentiel de H_h est $[\min c_\pm, +\infty[$,
- si $h(x)$ est suffisamment régulière, on dispose d'asymptotiques de type Weyl donnant la répartition des valeurs propres (en dessous du spectre essentiel éventuel mentionné ci-dessus) dans la limite \hbar tendant vers 0 (cf. [Dozias97], [Helffer97], [DimassiSjös99], ...).

Le but de ce chapitre sera d'étendre ces résultats au cas où \mathcal{H} est de dimension plus grande voire infinie comme cela a pu être fait dans un cadre pseudo-différentiel avec symbole opératoire dans [Balazard85]. Après une section de rappel sur les fonctions à valeurs dans un espace de Banach, les deux sections suivantes traitent la question de l'essentielle autoadjonction sur certains domaines ou au moins de l'existence d'extensions autoadjointes, la quatrième s'intéresse au problème de la localisation du spectre essentiel.

Dans tout ce chapitre, on se fixe Ω un ouvert connexe de \mathbb{R}^d et \mathcal{H} un espace de Hilbert séparable.

2.1 Rappel sur les fonctions à valeurs dans un espace de Banach

On consacre cette section à rappeler, sans preuve, des résultats sur les fonctions de Ω à valeurs dans E un espace de Banach. On renvoie à [Mikusiński78], [Yosida78] V. §4

et [Droniou01] pour plus de détails sur l'intégration de fonctions à valeurs vectorielles décrite dans la Section 2.1.3.

2.1.1 Fonctions par morceaux, gradient et laplacien p.p.

Définition 2.1 Soit f une fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{C} .

On dit que f est continue par morceaux s'il existe une subdivision de \mathbb{R}

$$-\infty = a_0 < a_1 < \cdots < a_n < a_{n+1} = +\infty \quad (2.1)$$

telle que f est continue sur chacun des intervalles ouverts $]a_j, a_{j+1}[$ pour $0 \leq j \leq n$ et que f admet des limites finies à gauche et à droite en a_j pour $1 \leq j \leq n$.

De manière plus générale, on dit que f est \mathcal{C}^k par morceaux s'il existe une subdivision (2.1) de \mathbb{R} telle que f est \mathcal{C}^k sur chacun des intervalles ouverts $]a_j, a_{j+1}[$ pour $0 \leq j \leq n$ et que les dérivées de f jusqu'à l'ordre k admettent des limites finies à gauche et à droite en a_j pour $1 \leq j \leq n$. Dans cette situation, on note \tilde{f}' la fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{C} qui vaut la dérivée de f aux points où la fonction est dérivable et 0 (par exemple) ailleurs.

Définition 2.2 Soit f une fonction de \mathbb{R}^d dans \mathbb{C} . On suppose que f est deux fois dérivable partout sauf en un nombre fini de points.

Dans cette situation, on note $\tilde{\nabla}_x f$ la fonction de \mathbb{R}^d dans \mathbb{C}^d qui vaut le gradient de f aux points où la fonction est dérivable et 0 ailleurs. De même, on note $\tilde{\Delta}_x f$ la fonction de \mathbb{R}^d dans \mathbb{C} qui vaut le laplacien de f aux points où celui-ci existe et 0 ailleurs.

2.1.2 Dérivation

Définition 2.3 Soit f une fonction de Ω dans l'espace $\mathcal{L}(E)$ des endomorphismes continues de E et soit $k \in \mathbb{N}$. On dit que f est

- (normiquement) \mathcal{C}^k si f est \mathcal{C}^k pour la norme d'endomorphisme de $\mathcal{L}(E)$,
- fortement \mathcal{C}^k si pour tout φ dans E , $x \rightarrow f(x)(\varphi)$ est \mathcal{C}^k pour la norme de E ,
- faiblement \mathcal{C}^k si pour tout l dans le dual E' de E et pour tout φ dans E , la fonction $x \rightarrow l(f(x)(\varphi))$ est \mathcal{C}^k à valeurs complexes.

Remarque 2.1 Le théorème de Banach-Steinhaus implique que si f est fortement \mathcal{C}^{k+1} alors f est normiquement \mathcal{C}^k .

2.1.3 Intégrale de Bochner et convolution

Après avoir rappelé la définition de l'intégrale de Bochner, on énonce (sans preuve) des généralisations de théorèmes usuels dans le cadre de l'intégration.

Définition 2.4 Soit φ une fonction de Ω dans E . On dit que φ est

- faiblement mesurable si pour tout l dans le dual E' de E , $x \rightarrow l(\varphi(x))$ est mesurable à valeurs complexes,
- fortement mesurable s'il existe une suite (φ_n) de fonctions simples à valeurs dans E ($\varphi_n = \sum_{j=1}^{m_n} \alpha_{j,n} \mathbf{1}_{B_{j,n}}$ avec chaque $B_{j,n} \subseteq \Omega$ mesurable et de mesure fini) qui converge vers φ p.p.
- Bochner intégrable s'il existe une suite (φ_n) de fonctions simples à valeurs dans E qui converge vers φ p.p. et telle que

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \int_{\Omega} \|\varphi_n(x) - \varphi(x)\| dx = 0.$$

On peut alors donner un sens à l'intégrale

$$\int_{\Omega} \varphi(x) dx$$

comme une limite d'intégrale de fonctions simples pour lesquelles la définition est celle usuelle.

Remarques 2.2

1. Un théorème dû à Pettis montre que si E est séparable, les notions de faible et forte mesurabilité sont équivalentes.
2. Un autre théorème dû à Bochner montre qu'une fonction φ fortement mesurable est Bochner intégrable ssi $\int_{\Omega} \|\varphi(x)\| dx < +\infty$.
3. On peut définir, pour $p \in [1, +\infty[$, l'espace $L^p(\Omega; E)$ des classes de fonctions mesurables φ (modulo p.p.) telles que $\int_{\Omega} \|\varphi(x)\|^p dx < +\infty$. Ce sont des espaces de Banach.
4. Soit \mathcal{D} un sous-espace vectoriel de E . Pour $p \in [1, +\infty[$, on note $L^p(\Omega; \mathcal{D})$ le sous-espace vectoriel de $L^p(\Omega; E)$ constitué des fonctions φ telles que $\varphi(x) \in \mathcal{D}$ p.p.

Théorème 2.1 (convergence dominée) Soit $p \in [1, +\infty[$ et soit (f_n) une suite de fonctions mesurables de Ω dans E . On suppose que

- (f_n) converge p.p. vers une fonction f ,
- il existe une fonction $g \in L^p(\Omega; E)$ telle que pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\|f_n\| \leq g$ p.p.

Alors $f \in L^p(\Omega; E)$ et

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \|f_n - f\|_{L^p} = 0.$$

En particulier, dans le cas $p = 1$,

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \int_{\Omega} f_n(x) dx = \int_{\Omega} f(x) dx.$$

Théorème 2.2 (Bochner) Soit $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^d; E)$ et soit K un compact de \mathbb{R}^d . Alors, il existe un ensemble mesurable $Z \subset \mathbb{R}^d$ de mesure nulle tel que

$$\forall x \in \mathbb{R}^d - Z, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \int_K \|f(x + hy) - f(x)\| dy = 0.$$

Théorème 2.3 Soient $\rho \in L^1(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$ et $u \in L^2(\mathbb{R}^d; E)$.

- L'intégrale

$$(\rho * u)(x) := \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x - y) u(y) dy \quad (2.2)$$

existe p.p. et $(\rho * u) \in L^2(\mathbb{R}^d; E)$ avec $\|\rho * u\|_{L^2(\mathbb{R}^d; E)} \leq \|\rho\|_{L^1(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})} \cdot \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^d; E)}$, i.e. l'opérateur $K_{\rho} u = \rho * u$ est borné sur $L^2(\mathbb{R}^d; E)$ avec $\|K_{\rho}\| \leq \|\rho\|_{L^1(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})}$. De plus, si $E = \mathcal{H}$ est un espace de Hilbert, $K_{\rho}^* = K_{\check{\rho}}$ où $\check{\rho}(x) := \rho(-x)$ (ainsi si ρ est paire, K_{ρ} est autoadjoint).

- Si de plus ρ (respectivement u) est C_c^{∞} , alors $\rho * u$ est C^{∞} et pour tout multi-indice de dérivation l

$$\partial_x^l (\rho * u) = (\partial_x^l \rho) * u \quad (\text{respectivement } \rho * (\partial_x^l u)).$$

Théorème 2.4 Soient $p, q, r \in [1, +\infty[$ tels que

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 + \frac{1}{r}$$

et soient $\rho \in L^p(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$ et $u \in L^q(\mathbb{R}^d; E)$ alors $(\rho * u)$ défini par la formule (2.2) existe p.p. et $(\rho * u) \in L^r(\mathbb{R}^d; E)$.

Théorème 2.5 Soit $p \in [1, +\infty[$ et soit \mathcal{D} un sous-espace vectoriel dense de E . Alors, $\mathcal{C}_c^\infty(\Omega; E) \cap L^p(\Omega; \mathcal{D})$ est dense dans $L^p(\Omega; E)$.

Théorème 2.6 Soit $u \in L^p(\mathbb{R}^d; E)$ avec $p \in [1, +\infty[$, on pose, pour $x, h \in \mathbb{R}^d$,

$$(\tau^h u)(x) = u(x + h).$$

Alors $\lim_{h \rightarrow 0} \|\tau^h u - u\|_{L^p} = 0$.

2.2 Extensions autoadjointes d'opérateurs de Schrödinger

On se donne $(V(x))$ une famille d'opérateurs (bornés ou pas) sur \mathcal{H} paramétrée par x dans Ω telle que

- (V₀1) pour tout x dans Ω , $V(x)$ est autoadjoint de domaine \mathcal{D} indépendant de x ,
- (V₀2) $x \mapsto V(x)$ est fortement continue au sens de la résolvante i.e. pour tout φ dans \mathcal{H} , $x \mapsto (V(x) + i)^{-1}\varphi$ est continue,
- (V₀3) $x \mapsto V(x)$ est uniformément bornée inférieurement i.e.

$$\exists C \in \mathbb{R}, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad \forall \varphi \in \mathcal{H}, \quad \langle V(x)\varphi, \varphi \rangle \geq -C\|\varphi\|^2.$$

Dans l'espace de Hilbert $H = L^2(\Omega; \mathcal{H})$, on considère alors l'opérateur

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta_x + V(x) \tag{2.3}$$

défini de manière naturelle sur le domaine

$$D = \mathcal{C}_c^2(\Omega; \mathcal{H}) \cap L^2(\Omega; \mathcal{D}) \tag{2.4}$$

des fonctions à valeurs dans \mathcal{D} , à support compact et de classe \mathcal{C}^2 .

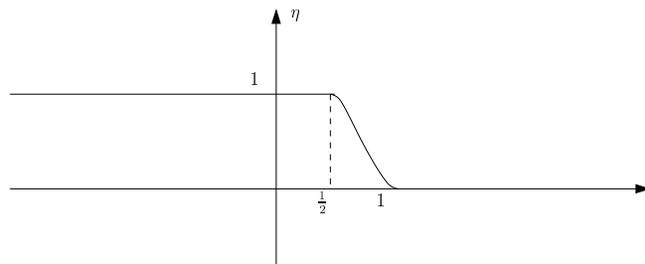
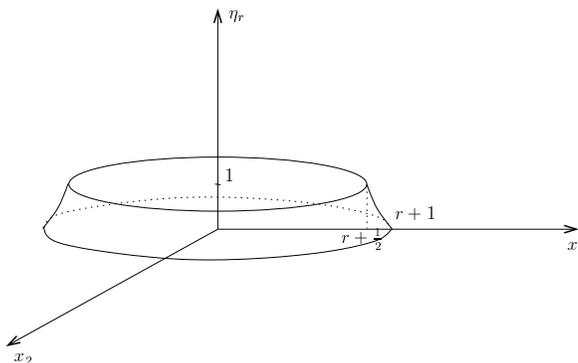
En procédant ainsi, on dispose d'un opérateur linéaire, de domaine dense dans H (cf. Théorème 2.5), symétrique et borné inférieurement sur son domaine. Le théorème de l'extension de Friedrichs (cf. [Kato76] VI §2 Section 3 ou [ReedSimonII75] Section X.3) stipule alors que (H_h, D) admet au moins une extension autoadjointe. Toutefois, il est bien évident (au moins dans le cas où Ω n'est pas \mathbb{R}^d tout entier et donc possède un bord) qu'il peut en exister plus qu'une seule. La section suivante permettra de montrer que H_h est essentiellement autoadjoint si $\Omega = \mathbb{R}^d$ et si $V(x)$ possède certaines propriétés.

Au Chapitre 4, nous travaillerons avec une extension autoadjointe quelconque de H_h que nous continuerons à noter H_h par souci de simplicité.

2.3 Essentielle autoadjonction

On se place dans la situation de la section précédente avec les hypothèses (V₀1)-(V₀3). Le but est alors de montrer que, si $\Omega = \mathbb{R}^d$ et si $V(x)$ est borné pour tout x et suffisamment régulier en x , H_h est essentiellement autoadjoint sur D (cf. Théorèmes 2.9 et 2.12).

On se donne $\eta \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}; [0, 1])$ telle que $\eta(t) = 1$ pour $t \leq \frac{1}{2}$ et $\eta(t) = 0$ pour $t \geq 1$. On introduit alors la fonction de troncature $\eta_r(x) = \eta(\|x\| - r)$ pour $r \geq 0$.

FIG. 2.1 – Fonction de troncature η .FIG. 2.2 – Fonction de troncature radiale η_r .

2.3.1 Le cas unidimensionnel ($d = 1$)

Propriétés régularisantes de la convolution

On énonce ici des résultats dans un cadre assez général dans la mesure où cela n'ajoute pas de difficulté supplémentaire (ce qui ne sera pas le cas dans le cas multidimensionnel) même s'ils seront utilisés uniquement avec $\rho(x) = \frac{|x|}{2}\eta(|x|)$ et ses dérivées.

Proposition 2.7 Soient $\rho \in L^1(\mathbb{R}; \mathbb{C})$ à support compact et $u \in L^2(\mathbb{R}; \mathcal{H})$

1. si ρ est continue par morceaux, alors $(\rho * u) \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}; \mathcal{H})$;
2. si ρ est continue \mathcal{C}^1 par morceaux, alors $(\rho * u) \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}; \mathcal{H})$ et

$$(\rho * u)'(x) = (\tilde{\rho}' * u)(x),$$

en particulier, si $\rho \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}; \mathbb{R})$, alors $\rho * u$ est \mathcal{C}^∞ ;

3. si ρ est \mathcal{C}^1 par morceaux et $u \in \mathcal{C}_c^0(\mathbb{R}; \mathcal{H})$, alors $(\rho * u) \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}; \mathcal{H})$ et

$$(\rho * u)'(x) = (\tilde{\rho}' * u)(x) + \sum_{x_s} s_\rho(x_s)u(x - x_s) \quad (2.5)$$

où la somme porte sur les points de discontinuité de ρ et où $s_\rho(x_s)$ est la "hauteur" du saut de discontinuité au point x_s à savoir

$$s_\rho(x_s) = \lim_{x \searrow x_s} \rho(x) - \lim_{x \nearrow x_s} \rho(x).$$

Preuve On note $[a, b]$ un intervalle compact de \mathbb{R} contenant le support de ρ .

1. Soient $x_0 \in \mathbb{R}$ et $h \in \mathbb{R}$, on a

$$\left\| \left[\tau^h(\rho * u) - \rho * u \right](x_0) \right\| = \left\| \left[\rho * (\tau^h u - u) \right](x_0) \right\| \leq \|\rho\|_2 \cdot \|\tau^h u - u\|_2$$

qui tend vers 0 quand h tend vers 0 d'après le Théorème 2.6.

2. Soient $x_0 \in \mathbb{R}$ et $h \neq 0$, on a

$$\begin{aligned} \frac{\left[\tau^h(\rho * u) - \rho * u \right](x_0)}{h} &= \left(\frac{\tau^h \rho - \rho}{h} * u \right)(x_0) \\ &= \int_{\mathbb{R}} \frac{\tau^h \rho - \rho}{h}(z) u(x_0 - z) dy \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_0^1 \tilde{\rho}'(z + th) u(x_0 - z) dt dz. \end{aligned}$$

D'après le Théorème 2.1, cette quantité converge vers $(\tilde{\rho}' * u)(x_0)$ quand h tend vers 0 (convergence simple p.p. de l'intégrande vers $\tilde{\rho}'(z)u(x_0 - z)$ avec domination par $\|\tilde{\rho}'\|_{\infty} \cdot \|u(x_0 - z)\|$ qui est intégrable puisque u est L^2). On conclut alors à l'aide du premier point appliqué à $\tilde{\rho}'$ en lieu et place de ρ .

3. D'après le point précédent, il suffit de traiter le cas des fonctions affines par morceaux, et à cause de la linéarité, il suffit de le montrer pour

$$\rho(x) = (\alpha x + \beta) \mathbf{1}_{[a,b]}(x).$$

Soient $x_0 \in \mathbb{R}$ et $h > 0$, on a

$$\frac{\left[\tau^h(\rho * u) - \rho * u \right](x_0)}{h} = I_g(x_0, h) + I_0(x_0, h) + I_d(x_0, h)$$

avec

$$\begin{aligned} I_0(x_0, h) &= \alpha \int_a^{b-h} u(x_0 - z) dz \\ &= \int_{\mathbb{R}} \tilde{\rho}'(z) \mathbf{1}_{[a, b-h]}(z) u(x_0 - z) dz \\ I_g(x_0, h) &= \frac{1}{h} \int_{a-h}^a \left[\alpha(z+h) + \beta \right] u(x_0 - z) dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h (s_{\rho}(a) - \alpha w) u(x_0 - a + w) dw + \alpha \int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_{[a-h, a]}(z) u(x_0 - z) dz \\ I_d(x_0, h) &= -\frac{1}{h} \int_{b-h}^b (\alpha z + \beta) u(x_0 - z) dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h (s_{\rho}(b) + \alpha w) u(x_0 - b + w) dw. \end{aligned}$$

D'après le Théorème 2.1, quand h tend vers 0, $I_0(x_0, h)$ et la dernière intégrale de $I_g(x_0, h)$ convergent respectivement vers $(\tilde{\rho}' * u)(x_0)$ et 0. D'après le cas facile du Théorème 2.2 (u est continue), quand h tend vers 0, $I_d(x_0, h)$ et la première intégrale de $I_g(x_0, h)$ convergent respectivement vers $s_{\rho}(b)u(x_0 - b)$ et $s_{\rho}(a)u(x_0 - a)$ (on notera que si u est seulement L^2 , on a seulement convergence p.p.). Le cas $h < 0$ se traite de manière tout à fait analogue. Enfin, on conclut en appliquant le premier point à $\tilde{\rho}'$ et en utilisant que u est continue pour obtenir que le second membre de (2.5) est continu.

□

Corollaire 2.8 Soit $\rho(x) = \frac{|x|}{2}\eta(|x|)$.

1. Soit $u \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}; \mathcal{H})$, alors $(\rho * u) \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}; \mathcal{H})$ et

$$(\rho * u)''(x) = u(x) + (\tilde{\rho}'' * u)(x)$$

où on a posé

$$\tilde{\rho}''(x) = \frac{1}{2}|x|\eta''(|x|) + \eta'(|x|).$$

2. Soit $u \in L^2(\mathbb{R}; \mathcal{H})$, alors $(\rho * u) \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}; \mathcal{H})$.

3. Soit $u \in \mathcal{C}_c^0(\mathbb{R}; \mathcal{H})$, alors $(\rho * u) \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}; \mathcal{H})$.

Remarque 2.3 Comme on le verra dans le cas multidimensionnel (cf. Proposition 2.11), la propriété fondamentale de la fonction $\frac{|x|}{2}$ est d'avoir pour dérivée seconde au sens des distributions la fonction delta en 0 (autrement dit, il s'agit de la fonction de Green associée au laplacien sur \mathbb{R} : elle est harmonique partout sauf en 0 et sa dérivée admet une discontinuité de hauteur 1 en ce point). Toutefois dans le cadre unidimensionnel beaucoup de fonctions \mathcal{C}^∞ par morceaux pourraient convenir pour ce qui va suivre.

Construction d'opérateurs essentiellement autoadjoints

Théorème 2.9 Soit $V(x)$ une famille d'opérateurs bornés symétriques sur \mathcal{H}

(V1) fortement continue en $x \in \mathbb{R}$ i.e. pour tout $\varphi \in \mathcal{H}$, $x \mapsto V(x)\varphi$ est continue,

(V2) localement bornée i.e.

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \exists h > 0, \quad \exists C(x, h), \quad \forall y \in [x - h, x + h], \quad \|V(y)\| \leq C(x, h),$$

(V3) globalement uniformément bornée inférieurement i.e.

$$\exists C \in \mathbb{R}, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad \forall \varphi \in \mathcal{H}, \quad \langle V(x)\varphi, \varphi \rangle \geq -C\|\varphi\|^2.$$

Dans $L^2(\mathbb{R}; \mathcal{H})$, l'opérateur

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

défini sur le domaine dense $D(H_h) = \mathcal{C}_c^2(\mathbb{R}; \mathcal{H})$ est essentiellement autoadjoint.

Remarques 2.4

1. Dans le cas scalaire (\mathcal{H} de dimension 1), il existe essentiellement deux méthodes pour prouver ce résultat :

- la première repose sur l'inégalité de Kato (cf. [ReedSimonII75] Théorèmes X.27 et X.28) pour les distributions et donc sur une notion de distribution positive, l'hypothèse (V1) pouvant même être affaiblie en V localement intégrable et l'hypothèse (V2) supprimée ;
- la seconde utilise un procédé de régularisation par convolution (cf. [Kato76] V. §3. 6. et III. §5. Exemple 5.32).

C'est cette dernière que nous avons choisi de généraliser ici car elle permet d'obtenir relativement facilement des résultats même dans le cas où $V(x)$ est un opérateur borné sur un espace de dimension infinie sans faire appel aux distributions. Toutefois, la première méthode permet d'obtenir le résultat dans le cas où $V(x)$ est seulement matriciel (de dimension finie) sans d'ailleurs avoir recours à la notion d'intégrale de Bochner.

2. Le domaine choisi pour l'opérateur peut vraisemblablement être réduit à $\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}; \mathcal{H})$, toutefois il faut alors s'assurer que $\mathcal{C}_c^2(\mathbb{R}; \mathcal{H})$ est bien dans le domaine de la clôture (autoadjointe) de notre opérateur car pour utiliser le Lemme 1.3 il faut savoir *a priori* que la fonction test que l'on propose est dans le domaine de l'opérateur (on pense en particulier aux vecteurs propres électroniques dans le cas de l'approximation de Born-Oppenheimer qui ne seront pas nécessairement \mathcal{C}^∞).

Preuve D'après le Théorème X.26 de [ReedSimonII75], il suffit de prouver que

$$\text{Ker}(H_{\hbar}^* + C + 1) = 0.$$

On pose $\rho(x) = \frac{1}{2}|x|\eta(|x|)$.

Soit $\psi \in \text{Ker}(H_{\hbar}^* + C + 1)$, pour tout $u \in D(H_{\hbar})$, on a

$$-\frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, u'' \rangle + \langle \psi, (V + C + 1)u \rangle = 0. \quad (2.6)$$

Fixons $[a, b]$ un intervalle compact de \mathbb{R} et soit $w \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}; \mathcal{H})$ tel que le support de w est inclus dans $]a, b[$. On pose alors $u = K_\rho w$. D'après le Corollaire 2.8, on a

$$u'' = w + K_{\tilde{\rho}'} w$$

avec

$$\tilde{\rho}''(x) = \frac{1}{2}|x|\eta''(|x|) + \eta'(|x|) \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}; \mathbb{R}).$$

Ainsi, (2.6) donne, si $r \geq 0$ est tel que $r \geq \max(b + 1, 1 - a)$,

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, w \rangle - \frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, K_{\tilde{\rho}'} w \rangle + \langle \psi, (V + C + 1)K_\rho w \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, w \rangle - \frac{\hbar^2}{2}\langle K_{\tilde{\rho}'} \psi, w \rangle + \langle \psi, (V + C + 1)\eta_r K_\rho w \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, w \rangle - \frac{\hbar^2}{2}\langle K_{\tilde{\rho}'} \psi, w \rangle + \langle K_\rho [(V + C + 1)\eta_r \psi], w \rangle, \end{aligned}$$

l'introduction de la fonction de troncature η_r étant possible dans la deuxième égalité puisque le support de $K_\rho w$ est inclus dans $[a - 1, b + 1]$.

Autrement dit

$$\langle \psi, w \rangle = \langle -K_{\tilde{\rho}'} \psi + 2\hbar^{-2}K_\rho [\eta_r (V + C + 1)\psi], w \rangle$$

pour tout $w \in \mathcal{C}_c^\infty(]a, b[; \mathcal{H})$. Or $\mathcal{C}_c^\infty(]a, b[; \mathcal{H})$ est dense dans $L^2(]a, b[; \mathcal{H})$, donc on a

$$\psi(x) = -(K_{\tilde{\rho}'} \psi)(x) + 2\hbar^{-2}K_\rho [\eta_r (V + C + 1)\psi](x) \text{ p.p. sur } [a, b]$$

D'après le Théorème 2.3, $K_{\tilde{\rho}'} \psi$ est \mathcal{C}^∞ puisque $\tilde{\rho}''$ est \mathcal{C}_c^∞ et, d'après le Corollaire 2.8, $K_\rho [\eta_r (V + C + 1)\psi]$ est \mathcal{C}^1 puisque $\eta_r (V + C + 1)\psi$ est L^2 . Ainsi ψ est \mathcal{C}^1 sur $]a, b[$.

En réinjectant cette information et d'après le Corollaire 2.8, on obtient donc que $K_\rho [\eta_r (V + C + 1)\psi]$ est \mathcal{C}^2 puisque $\eta_r (V + C + 1)\psi$ est désormais \mathcal{C}_c^0 (on utilise ici les hypothèses (V1) et (V2)). Finalement ψ est \mathcal{C}^2 sur $]a, b[$. Comme ceci est vrai quel que soit l'intervalle compact $[a, b]$ dans \mathbb{R} , ψ est donc \mathcal{C}^2 sur \mathbb{R} tout entier.

En particulier $\eta_r \psi$ appartient à $D(H_{\hbar})$ et, grâce à l'hypothèse (V3),

$$\int_{-r}^r \|\psi(x)\|^2 dx \leq \|\eta_r \psi\|^2 \leq \langle (H_{\hbar} + C + 1)(\eta_r \psi), \eta_r \psi \rangle =: A_r \in \mathbb{R}$$

Or on a

$$(H_{\hbar} + C + 1)(\eta_r \psi) = \eta_r (H_{\hbar}^* + C + 1)\psi - \frac{\hbar^2}{2} \eta_r'' \psi - \hbar^2 \eta_r' \psi' = -\hbar^2 \left[\frac{1}{2} \eta_r'' \psi + \eta_r' \psi' \right]$$

d'où

$$A_r = -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}} \left[\frac{1}{2} \eta_r''(x) \eta_r(x) \|\psi(x)\|^2 + \eta_r'(x) \eta_r(x) \langle \psi'(x), \psi(x) \rangle \right] dx$$

Par une intégration par parties, on a

$$\int_{\mathbb{R}} \eta_r''(x) \eta_r(x) \|\psi(x)\|^2 dx = -\|\eta_r' \psi\|^2 - \int_{\mathbb{R}} \eta_r'(x) \eta_r(x) [\langle \psi'(x), \psi(x) \rangle + \langle \psi(x), \psi'(x) \rangle] dx$$

si bien que

$$A_r = \frac{\hbar^2}{2} \left[\|\eta_r' \psi\|^2 + \int_{\mathbb{R}} \eta_r'(x) \eta_r(x) (\langle \psi(x), \psi'(x) \rangle - \langle \psi'(x), \psi(x) \rangle) dx \right]$$

comme la quantité A_r est réelle et que $\langle \psi(x), \psi'(x) \rangle - \langle \psi'(x), \psi(x) \rangle$ est imaginaire pure, l'intégrale correspondante est nulle et on a

$$\int_{-r}^r \|\psi(x)\|^2 dx \leq A_r = \frac{\hbar^2}{2} \|\eta_r' \psi\|^2 \leq \frac{\hbar^2}{2} \|\eta_r'\|_{\infty}^2 \int_{|x| \geq r} \|\psi(x)\|^2 dx$$

d'où, en faisant tendre r vers l'infini, $\psi = 0$ ce qui conclut. \square

2.3.2 Le cas multidimensionnel ($d \geq 2$)

Propriétés régularisantes de la fonction de Green

Définition 2.5 On introduit la fonction de Green "radiale" associée au laplacien dans \mathbb{R}^d tout entier définie par

$$\rho_0 : r \in]0, +\infty[\mapsto \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \ln r & \text{si } d = 2 \\ -\frac{1}{(d-2)V_d r^{d-2}} & \text{si } d \geq 3 \end{cases}$$

où V_d désigne la surface d'une sphère de rayon 1 dans \mathbb{R}^d .

On pose alors, pour $x \in \mathbb{R}^d - \{0\}$,

$$\rho(x) = \eta(\|x\|) \rho_0(\|x\|).$$

Lemme 2.10 On dispose des résultats suivants

1. si $p \in [1, +\infty[$ est tel que $(d-2)p < d$, $\rho \in L^p(\mathbb{R}^d; \mathbb{R})$,
2. $\tilde{\nabla}_x \rho \in L^1(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d)$,
3. $\tilde{\Delta}_x \rho \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d; \mathbb{R})$ et même $\tilde{\Delta}_x \rho(x) = 0$ si $\|x\| \leq \frac{1}{2}$.

Preuve On passe en coordonnées sphériques.

1. Comme ρ ne dépend que de la coordonnée radiale, on a, si $d = 2$,

$$\int_{\mathbb{R}^2} |\rho(x)|^p dx = \int_0^{+\infty} \eta(r)^p |\rho_0(r)|^p 2\pi r dr \leq 2\pi^{1-p} \int_0^1 (-\ln r)^p r dr < +\infty$$

et, si $d \geq 3$,

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\rho(x)|^p dx \leq \int_0^1 |\rho_0(r)|^p r^{d-1} V_d dr = (d-2)^{-p} V_d^{1-p} \int_0^1 r^{d-1-p(d-2)} dr$$

qui est fini si et seulement si $d-1-p(d-2) > -1$.

2. On a $\nabla_x \rho(x) = \frac{x}{r} \left[\eta'(r) \rho_0(r) + \eta(r) \rho_0'(r) \right]$, d'où

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \|\tilde{\nabla}_x \rho(x)\| dx &= \int_0^{+\infty} \left| \eta'(r) \rho_0(r) + \eta(r) \rho_0'(r) \right| r^{d-1} V_d dr \\ &\leq \int_{\frac{1}{2}}^1 \|\eta'\|_\infty |\rho_0(r)| dr + \int_0^1 |\rho_0'(r)| r^{d-1} V_d dr \end{aligned}$$

où la deuxième intégrande est effectivement intégrable en 0 puisqu'elle se prolonge par continuité de valeur 1.

3. ρ est clairement \mathcal{C}^∞ partout sauf en 0 donc $\tilde{\Delta}_x \rho$ est \mathcal{C}^∞ partout sauf peut-être en 0 et comme $\rho(x) = 0$ dès que $\|x\| \geq 1$, on a aussi $\Delta_x \rho(x) = 0$ en ces points d'où le support compact. Reste à voir ce qui se passe au voisinage de 0, soit donc $x \in \mathbb{R}^d - \{0\}$ tel que $\|x\| < \frac{1}{2}$, au voisinage d'un tel point on a $\rho(y) = \rho_0(\|y\|)$ d'où

$$\Delta_x \rho(x) = \rho_0''(\|x\|) + \frac{d-1}{\|x\|} \rho_0'(\|x\|) = 0.$$

□

À cause de la singularité spécifique en 0 de ρ_0 , on ne peut pas énoncer de résultats aussi généraux que dans le cas unidimensionnel, toutefois on dispose quand même de la proposition suivante.

Proposition 2.11 *Soit $u \in L^2(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$ et soit $p \in [1, +\infty[$ tel que $(d-2)p < d$. Alors*

1. *si $d \leq 3$ ou si $d \geq 4$ et si de plus $u \in L^q(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$ avec $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, $\rho * u \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$,*
2. *si $u \in \mathcal{C}_c^0(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$, $\rho * u \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$ et $\nabla_x(\rho * u) = (\tilde{\nabla}_x \rho) * u$,*
3. *si $u \in \mathcal{C}_c^1(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$, $\rho * u \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$ et $\Delta_x(\rho * u) = (\tilde{\nabla}_x \rho) * (\nabla_x u) = u + (\tilde{\Delta}_x \rho) * u$.*

Remarque 2.5 La notation $(\tilde{\nabla}_x \rho) * (\nabla_x u)$ est à comprendre au sens de l'égalité (2.7).

Preuve

1. Soient $x_0 \in \mathbb{R}^d$ et $h \in \mathbb{R}^d$, on a, d'après l'inégalité de Hölder,

$$\left\| \left[\tau^h(\rho * u) - \rho * u \right] (x_0) \right\| = \left\| \left[\rho * (\tau^h u - u) \right] (x_0) \right\| \leq \|\rho\|_p \cdot \|\tau^h u - u\|_q$$

or $\tau^h u - u$ tend vers 0 dans L^q quand h tend vers 0 (cf. Théorème 2.6) et ρ est L^p (cf. Lemme 2.10), d'où la continuité en x_0 (on pourra noter qu'on a en fait obtenu l'uniforme continuité sur \mathbb{R}). Le cas $d \leq 3$ correspond simplement au choix $p = q = 2$.

2. Soient $x_0 \in \mathbb{R}^d, v \in \mathbb{R}^d$ et $h \in \mathbb{R}$ tel que $h \neq 0$, on a

$$\begin{aligned} \frac{\left[\tau^{hv}(\rho * u) - \rho * u \right] (x_0)}{h} &= \left(\frac{\tau^{hv} \rho - \rho}{h} * u \right) (x_0) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^1 v \cdot (\tilde{\nabla}_x \rho) (y + thv) u(x_0 - y) dt dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^1 v \cdot (\tilde{\nabla}_x \rho) (z) u(x_0 - z + thv) dt dz. \end{aligned}$$

D'après le Théorème 2.1, cette quantité converge vers $\left[\left(v \cdot \tilde{\nabla}_x \rho \right) * u \right] (x_0)$ quand h tend vers 0 (convergence simple de l'intégrande vers $\left(v \cdot \tilde{\nabla}_x \rho \right) (z) u(x_0 - z)$ avec domination par $\|v \cdot \tilde{\nabla}_x \rho\| \cdot \|u\|_\infty$ qui est intégrable d'après le Lemme 2.10). Par ailleurs, on a

$$\begin{aligned} \left\| \left[\tau^h \left[\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * u \right] - \left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * u \right] (x_0) \right\| &= \left\| \left[\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * \left(\tau^h u - u \right) \right] (x_0) \right\| \\ &\leq \| \tilde{\nabla}_x \rho \|_1 \cdot \| \tau^h u - u \|_\infty \end{aligned}$$

qui tend vers 0 quand h tend vers 0 puisque $\tilde{\nabla}_x \rho$ est L^1 (cf. Lemme 2.10) et que u est uniformément continue.

3. Soient $x_0 \in \mathbb{R}^d, v \in \mathbb{R}^d$ et $h \in \mathbb{R}$ tel que $h \neq 0$, on a

$$\begin{aligned} \frac{\left(\tau^{hv} \left[\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * u \right] - \left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * u \right) (x_0)}{h} &= \left[\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * \frac{\tau^{hv} u - u}{h} \right] (x_0) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^1 \left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) (x_0 - y) (v \cdot \nabla_x u) (y + thv) dt dy. \end{aligned}$$

D'après le Théorème 2.1, cette quantité converge vers $\left[\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * (v \cdot \nabla_x u) \right] (x_0)$ quand h tend vers 0 (convergence simple de l'intégrande vers

$$\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) (x_0 - y) (v \cdot \nabla_x u) (y)$$

avec domination par

$$\left\| \left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) (x_0 - y) \right\| \cdot \|v \cdot \nabla_x u\|_\infty$$

qui est intégrable d'après le Lemme 2.10). Par ailleurs, par le même argument que ci-dessus $\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * (v \cdot \nabla_x u)$ est continue donc $\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * u$ est \mathcal{C}^2 . Enfin, en passant en coordonnées sphériques, on a

$$\begin{aligned} &\left[\left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) * (\nabla_x u) \right] (x_0) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \left(\tilde{\nabla}_x \rho \right) (y) \cdot (\nabla_x u) (x_0 - y) dy \\ &= \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \int_0^{+\infty} r^{d-1} (\eta \rho_0)'(r) (\omega \cdot \nabla_x u) (x_0 - r\omega) dr d\omega \\ &= \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \left[-r^{d-1} (\eta \rho_0)'(r) u(x_0 - r\omega) \right]_0^{+\infty} d\omega \\ &\quad + \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \int_0^{+\infty} \left[r^{d-1} (\eta \rho_0)' \right]'(r) u(x_0 - r\omega) dr d\omega \\ &= \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \frac{1}{V_d} u(x_0) d\omega \\ &\quad + \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \int_0^{+\infty} \left[(\eta \rho_0)'' + \frac{d-1}{r} (\eta \rho_0)' \right] (r) u(x_0 - r\omega) r^{d-1} dr d\omega \\ &= u(x_0) + \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \int_0^{+\infty} \left(\tilde{\Delta}_x \rho \right) (r\omega) u(x_0 - r\omega) r^{d-1} dr d\omega \\ &= u(x_0) + \left[\left(\tilde{\Delta}_x \rho \right) * u \right] (x_0) \end{aligned} \tag{2.7}$$

ce qui conclut. □

Construction d'opérateurs essentiellement autoadjoints

Théorème 2.12 Soit $V(x)$ une famille d'opérateurs bornés symétriques sur \mathcal{H}

(V1_d) fortement \mathcal{C}^1 en $x \in \mathbb{R}^d$ i.e. pour tout $\varphi \in \mathcal{H}$, $x \mapsto V(x)\varphi$ est \mathcal{C}^1 ,

(V2_d) de gradient localement borné i.e.

$$\forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \exists h > 0, \quad \exists C(x, h), \quad \forall y \in \overline{B}(x, h), \quad \|\nabla_x V(y)\| \leq C(x, h),$$

(V3_d) globalement uniformément bornée inférieurement i.e.

$$\exists C \in \mathbb{R}, \quad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \forall \varphi \in \mathcal{H}, \quad \langle V(x)\varphi, \varphi \rangle \geq -C\|\varphi\|^2.$$

Dans $L^2(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$, l'opérateur

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta_x + V(x)$$

défini sur le domaine dense $D(H_h) = \mathcal{C}_c^2(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$ est essentiellement autoadjoint.

Remarque 2.6 La preuve proposée est analogue à celle du cas unidimensionnel (cf. Théorème 2.9) avec quelques difficultés supplémentaires qui proviennent de la singularité en 0 de la fonction de Green multidimensionnelle ρ_0 .

Preuve Soit $\psi \in \text{Ker}(H_h^* + C + 1)$, pour tout $u \in D(H_h)$, on a

$$-\frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, \Delta_x u \rangle + \langle \psi, (V + C + 1)u \rangle = 0. \quad (2.8)$$

Fixons $R > 0$ et notons Ω_R la boule ouverte de \mathbb{R}^d centrée en 0 et de rayon R . Soit $w \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d; \mathcal{H})$ tel que le support de w est inclus dans Ω_R . On pose alors $u = K_\rho w$. D'après le dernier point de la Proposition 2.11, on a

$$\Delta_x u = w + K_{\tilde{\Delta}_x \rho} w$$

avec $\tilde{\Delta}_x \rho \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d; \mathbb{R})$. Ainsi, (2.8) donne, si $r \geq 0$ est tel que $r \geq R + 1$,

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, w \rangle - \frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, K_{\tilde{\Delta}_x \rho} w \rangle + \langle \psi, (V + C + 1)K_\rho w \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, w \rangle - \frac{\hbar^2}{2}\langle K_{\tilde{\Delta}_x \rho} \psi, w \rangle + \langle \psi, (V + C + 1)\eta_r K_\rho w \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2}\langle \psi, w \rangle - \frac{\hbar^2}{2}\langle K_{\tilde{\Delta}_x \rho} \psi, w \rangle + \langle K_\rho [(V + C + 1)\eta_r \psi], w \rangle. \end{aligned}$$

l'introduction de la fonction de troncature η_r étant possible dans la deuxième égalité puisque le support de $K_\rho w$ est inclus dans $\overline{\Omega}_{R+1}$.

Autrement dit

$$\langle \psi, w \rangle = \langle -K_{\tilde{\Delta}_x \rho} \psi + 2\hbar^{-2}K_\rho[\eta_r(V + C + 1)\psi], w \rangle$$

pour tout $w \in \mathcal{C}_c^\infty(\Omega_R; \mathcal{H})$. Or $\mathcal{C}_c^\infty(\Omega_R; \mathcal{H})$ est dense dans $L^2(\Omega_R; \mathcal{H})$, donc on a

$$\psi(x) = -(K_{\tilde{\Delta}_x \rho} \psi)(x) + 2\hbar^{-2}K_\rho[\eta_r(V + C + 1)\psi](x) \text{ p.p. dans } \Omega_R$$

D'après le Théorème 2.3, $K_{\tilde{\Delta}_x \rho} \psi$ est \mathcal{C}^∞ puisque $\tilde{\Delta}_x \rho$ est \mathcal{C}_c^∞ .

Par ailleurs, dans le cas où $d \leq 3$, d'après le premier point de la Proposition 2.11, $K_\rho[\eta_r(V + C + 1)\psi]$ est \mathcal{C}^0 puisque $\eta_r(V + C + 1)\psi$ est L^2 . Si $d \geq 4$, c'est un peu

plus compliqué d'obtenir le même résultat et on procède ainsi : fixons $p > 1$ tel que $(d-2)p < d$; d'après le Théorème 2.4, comme ρ est L^p et $\eta_r(V+C+1)\psi$ est L^2 , $K_\rho[\eta_r(V+C+1)\psi]$ est L^{r_1} avec

$$\frac{1}{r_1} = -\left(1 - \frac{1}{p}\right) + \frac{1}{2} \quad ;$$

ainsi ψ est L^{r_1} sur Ω_R comme ceci est vrai pour tout $R > 0$, ψ est donc localement L^{r_1} ; maintenant si

$$\frac{1}{r_1} + \frac{1}{p} \leq 1$$

on peut appliquer le premier point de la Proposition 2.11 avec r_1 dans le rôle de 'q' pour $\eta_r(V+C+1)\psi$ et son exposant conjugué $\frac{r_1}{r_1-1}$ (qui est plus petit que p d'après l'inégalité précédente) dans le rôle de 'p' pour ρ et obtenir que $K_\rho[\eta_r(V+C+1)\psi]$ est \mathcal{C}^0 ; sinon on peut réappliquer la Proposition 2.11 pour obtenir que $K_\rho[\eta_r(V+C+1)\psi]$ est L^{r_2} avec

$$\frac{1}{r_2} = -\left(1 - \frac{1}{p}\right) + \frac{1}{r_1} = -2\left(1 - \frac{1}{p}\right) + \frac{1}{2}$$

et donc ψ est localement L^{r_2} ; si

$$\frac{1}{r_2} + \frac{1}{p} \leq 1$$

on obtient que $K_\rho[\eta_r(V+C+1)\psi]$ est \mathcal{C}^0 sinon on continue le procédé jusqu'à avoir

$$\frac{1}{r_k} + \frac{1}{p} = 1 - (k+1)\left(1 - \frac{1}{p}\right) + \frac{1}{2} \leq 1.$$

Dans tous les cas, on a obtenu que ψ est \mathcal{C}^0 sur Ω_R quel que soit $R > 0$ donc sur \mathbb{R}^d .

En réinjectant cette information et d'après le deuxième point de la Proposition 2.11, on obtient donc que $K_\rho[\eta_r(V+C+1)\psi]$ est \mathcal{C}^1 puisque $\eta_r(V+C+1)\psi$ est désormais \mathcal{C}_c^0 (on utilise ici les hypothèses (V1_d) et (V2_d)). Ainsi ψ est \mathcal{C}^1 sur Ω_R donc sur \mathbb{R}^d .

En réinjectant une nouvelle fois cette information et d'après le troisième point de la Proposition 2.11, $K_\rho[\eta_r(V+C+1)\psi]$ est \mathcal{C}^2 puisque $\eta_r(V+C+1)\psi$ est désormais \mathcal{C}_c^1 (on utilise ici encore les hypothèses (V1_d) et (V2_d)). Ainsi ψ est \mathcal{C}^2 sur Ω_R donc sur \mathbb{R}^d .

En particulier $\eta_r\psi$ appartient à $D(H_{\hbar})$ et, grâce à l'hypothèse (V3_d),

$$\int_{\Omega_r} \|\psi(x)\|^2 dx \leq \|\eta_r\psi\|^2 \leq \langle (H_{\hbar} + C + 1)(\eta_r\psi), \eta_r\psi \rangle =: A_r \in \mathbb{R}$$

Or on a

$$\begin{aligned} (H_{\hbar} + C + 1)(\eta_r\psi) &= \eta_r(H_{\hbar}^* + C + 1)\psi - \frac{\hbar^2}{2}(\Delta_x\eta_r)\psi - \hbar^2(\nabla_x\eta_r) \cdot (\nabla_x\psi) \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{2}(\Delta_x\eta_r)\psi + (\nabla_x\eta_r) \cdot (\nabla_x\psi) \right] \end{aligned}$$

d'où

$$A_r = -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2}(\Delta_x\eta_r)(x)\eta_r(x)\|\psi(x)\|^2 + (\nabla_x\eta_r)(x)\eta_r(x) \cdot \langle (\nabla_x\psi)(x), \psi(x) \rangle \right] dx$$

Par une intégration par parties, on a

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} (\Delta_x\eta_r)(x)\eta_r(x)\|\psi(x)\|^2 dx &= \\ -\|(\nabla_x\eta_r)\psi\|^2 - \int_{\mathbb{R}^d} (\nabla_x\eta_r)(x)\eta_r(x) \cdot [\langle (\nabla_x\psi)(x), \psi(x) \rangle + \langle \psi(x), (\nabla_x\psi)(x) \rangle] dx & \end{aligned}$$

si bien que

$$A_r = \frac{\hbar^2}{2} \left[\|(\nabla_x \eta_r) \psi\|^2 + \int_{\mathbb{R}^d} (\nabla_x \eta_r)(x) \eta_r(x) \cdot (\langle \psi(x), (\nabla_x \psi)(x) \rangle - \langle (\nabla_x \psi)(x), \psi(x) \rangle) dx \right]$$

comme la quantité A_r est réelle et que

$$(\nabla_x \eta_r)(x) \eta_r(x) \cdot \langle \psi(x), (\nabla_x \psi)(x) \rangle - \langle (\nabla_x \psi)(x), \psi(x) \rangle$$

est imaginaire pure, l'intégrale correspondante est nulle et on a

$$\int_{\Omega_r} \|\psi(x)\|^2 dx \leq A_r = \frac{\hbar^2}{2} \|(\nabla_x \eta_r) \psi\|^2 \leq \frac{\hbar^2}{2} \|\nabla_x \eta\|_\infty^2 \int_{\|x\| \geq r} \|\psi(x)\|^2 dx$$

d'où, en faisant tendre r vers l'infini, $\psi = 0$ ce qui conclut. \square

2.4 Localisation du spectre essentiel

On se place maintenant dans la situation où \mathcal{H} est de dimension finie et où $d = 1$ et on veut pouvoir préciser des intervalles d'énergie dans lesquels on est sûr que le spectre de l'opérateur H_\hbar est purement ponctuel.

Théorème 2.13 *Supposons que*

$$\forall \varphi \in \mathcal{H}, \quad \langle V(x)\varphi, \varphi \rangle \geq W_0(x) \|\varphi\|^2$$

où W_0 est une fonction continue et uniformément bornée inférieurement. On suppose de plus que

$$c = \liminf_{|x| \rightarrow +\infty} W_0(x) \in]-\infty, +\infty]$$

existe.

Alors, dans l'intervalle $] -\infty, c[$, le spectre de l'opérateur $H_\hbar = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ essentiellement autoadjoint sur $\mathcal{C}_c^2(\mathbb{R}; \mathcal{H})$ est discret.

Preuve On note $V_0(x)$ le potentiel matriciel $W_0(x) Id_{\mathcal{H}}$ et on considère les deux opérateurs, essentiellement autoadjoints sur $\mathcal{D} = \mathcal{C}_c^2(\mathbb{R}; \mathcal{H})$ (cf. Théorème 2.9), H_\hbar et H_\hbar^0 obtenus avec les potentiels matriciels $V(x)$ et $V_0(x)$.

On a de manière évidente, pour $x \in \mathbb{R}$, $V(x) \geq V_0(x)$ au sens des formes quadratiques et donc

$$H_\hbar \geq H_\hbar^0$$

sur \mathcal{D} .

Par ailleurs, $K_\hbar = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + W_0(x)$ est essentiellement autoadjoint sur $\mathcal{C}_c^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$ et d'après XIII.4 Exemple 6 de [ReedSimonIV78] (ou les exemples après le Théorème 4.19 de [DimassiSjös99]), son spectre essentiel est contenu dans la demi-droite $I = [c, +\infty[$. Il s'en suit que $\sigma_{\text{ess}}(H_\hbar^0) = \sigma_{\text{ess}}(K_\hbar \otimes Id_{\mathcal{H}}) \subseteq I$.

On conclut alors à l'aide d'un principe du minimax pour les opérateurs essentiellement autoadjoints.

Lemme 2.14 *(H, \mathcal{D}) un opérateur essentiellement autoadjoint borné inférieurement, on note $(\lambda_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ une énumération croissante du bas du spectre de la clôture (autoadjointe) de H (les valeurs propres discrètes sont comptées avec multiplicité et un point du spectre essentiel est compté avec multiplicité infinie auquel cas (λ_n) est alors constant à partir*

d'un certain rang). Pour L sous-espace vectoriel de dimension finie de \mathcal{D} non réduit à $\{0\}$, on pose

$$\lambda(L) := \sup_{\varphi \in L, \|\varphi\|=1} \langle \varphi, H\varphi \rangle = \max_{\varphi \in L, \|\varphi\|=1} \langle \varphi, H\varphi \rangle.$$

On définit alors

$$\lambda_n'' := \inf_{L \subset \mathcal{D}, \dim L = n} \lambda(L).$$

Alors, pour tout n dans \mathbb{N}^* , on a $\lambda_n = \lambda_n''$.

On procède de la façon suivante : pour tout n , si on note

$$\mu_n^{(0)} = \inf \left\{ \sup_{\varphi \in L, \|\varphi\|=1} \langle \varphi, H_h^{(0)} \varphi \rangle / L \subset \mathcal{D} \text{ avec } \dim L = n \right\},$$

on a clairement, $\mu_n \geq \mu_n^{(0)}$. De plus, si H_h^0 ne possède pas de spectre essentiel, on a $\lim_{n \rightarrow +\infty} \mu_n^{(0)} = +\infty$, donc il en va de même pour H_h qui a donc aussi un spectre purement discret. Traitons maintenant le cas où H_h^0 possède du spectre essentiel et notons $s_0 \geq c$ la borne inférieure de ce spectre. Raisonnons par l'absurde et supposons que H_h possède du spectre essentiel en dessous de c et notons $s < c$ sa borne inférieure, on a

$$c \leq s_0 = \lim_{m \rightarrow +\infty} \mu_m^{(0)} \leq \lim_{m \rightarrow +\infty} \mu_m = s < c,$$

d'où une contradiction.

Finalement, on a donc que

$$\sigma_{\text{ess}}(H_h) \subseteq [c, +\infty[$$

et que dans l'intervalle $] -\infty, c[$ possède uniquement du spectre discret (éventuellement vide). \square

Preuve du Lemme 2.14 Le résultat découle du Théorème 4.5.3 de [Davies95] si on montre que \mathcal{D} est un "core" pour la forme quadratique fermée bornée inférieurement Q associée à H .

Quitte à ajouter une constante à H , on peut supposer que $H \geq 0$ auquel cas il suffit de montrer que \mathcal{D} est dense dans $D(Q) = D(H^{1/2})$ pour la norme

$$\|\varphi\|_Q = \sqrt{\|\varphi\|^2 + Q\varphi}.$$

Comme on sait que c'est le cas pour $\mathcal{D} = D(H)$, il suffit de montrer que \mathcal{D} est dense dans $D(H)$ pour la norme $\|\cdot\|_Q$ (par hypothèse, \mathcal{D} est dense dans $D(H)$ pour la norme

$$\|\varphi\|_H = \sqrt{\|\varphi\|^2 + \|H\varphi\|^2}.$$

Or, si $\varphi \in D(H)$, on a

$$Q\varphi = \langle \varphi, H\varphi \rangle \leq \|\varphi\| \cdot \|H\varphi\| \leq \frac{\|\varphi\|^2 + \|H\varphi\|^2}{2} = \frac{\|\varphi\|_H^2}{2},$$

d'où

$$\|\varphi\|_Q^2 \leq \frac{3}{2} \|\varphi\|_H^2$$

ce qui conclut. \square

Chapitre 3

Fonctions de Hermite et équation de Schrödinger scalaire

Introduction

Ce troisième chapitre, entre formalisme et technique, reprend principalement la présentation proposée par Hagedorn dans [Hagedorn98] des états cohérents gaussiens (les preuves ont été détaillées dans le cas multidimensionnel) à laquelle on a adjoint quelques résultats importants pour les deux derniers chapitres (notamment des preuves détaillées des Propositions 3.12 et 3.13 ainsi que la Proposition 3.15). Sans être exhaustif, il regroupe les principales propriétés de ces états cohérents dont le point d'orgue est le Théorème 3.16.

La présentation adoptée par Hagedorn confèrent à la plupart des preuves concision et élégance, toutefois certaines restent laborieuses auquel cas la preuve a le plus souvent été renvoyée en Annexe A pour soulager la lecture.

3.1 Opérateurs de créations et d'annihilations

Cette section donne une généralisation des opérateurs de création et d'annihilation de l'oscillateur harmonique unidimensionnel

$$a = \frac{x + \frac{\partial}{\partial x}}{\sqrt{2}}, \quad a^\dagger = \frac{x - \frac{\partial}{\partial x}}{\sqrt{2}}.$$

3.1.1 Définitions

Définition 3.1 Soient $A, B \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$, $\hbar > 0$, $a, \eta \in \mathbb{R}^d$. On pose $p_{\hbar, x} = \frac{\hbar}{i} \nabla_x$ et on note $\langle v, w \rangle = \sum_{k=1}^d \overline{v_k} w_k$ le produit scalaire hermitien canonique sur \mathbb{C}^d . Pour $v \in \mathbb{C}^d$, on pose

$$\mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\langle \overline{B}v, x - a \rangle + i \langle \overline{A}v, p_{\hbar, x} - \eta \rangle) \quad (3.1)$$

(appelé opérateur d'annihilation) et son adjoint formel

$$\mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v)^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\langle B\overline{v}, x - a \rangle - i \langle A\overline{v}, p_{\hbar, x} - \eta \rangle) \quad (3.2)$$

(opérateur de création) considérés tous deux comme opérateurs soit de la classe de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$ dans elle-même, soit de $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$ dans lui-même.

On définit deux applications $f : \mathcal{M}_d(\mathbb{C}) \times \mathcal{M}_d(\mathbb{C}) \longrightarrow \text{Antisym}_d(\mathbb{C}) \times \text{Herm}_d(\mathbb{C})$ et $g : \mathcal{M}_d(\mathbb{C}) \times \mathcal{M}_d(\mathbb{C}) \longrightarrow \text{Herm}_d(\mathbb{C})$ respectivement par

$$\begin{aligned} f(A, B) &= (A^t B - B^t A, A^* B + B^* A) \\ g(A, B) &= A^* B + B^* A \end{aligned}$$

et on pose $\mathcal{V} = f^{-1}((0, 2I))$, $\mathcal{U} = g^{-1}(\text{Herm}_d^{++}(\mathbb{C}))$.

Remarques 3.1

1. Dans la suite, on utilisera essentiellement les opérateurs de création et d'annihilation pour $(A, B) \in \mathcal{V}$ ou \mathcal{U} .
2. $\mathcal{V} \subseteq GL_d(\mathbb{C})^2$, en effet, pour $z \in \mathbb{C}^d$, on a

$$2\|z\|^2 = \langle (A^* B + B^* A)z, z \rangle = \langle Bz, Az \rangle + \langle Az, Bz \rangle,$$

de même $\mathcal{U} \subseteq GL_d(\mathbb{C})^2$.

3. Si $(A, B) \in \mathcal{V}$, BA^{-1} est symétrique de partie réelle définie positive $(AA^*)^{-1}$, de même AB^{-1} est symétrique de partie réelle $(BB^*)^{-1}$ et si $(A, B) \in \mathcal{U}$, BA^{-1} et AB^{-1} sont de partie hermitienne définie positive.
4. \mathcal{V} est une sous-variété réelle de $\mathcal{M}_d(\mathbb{C})^2$, de dimension $2d^2 + d$ et lisse (f est une submersion : $D_{(A,B)}f(A', B') = f(A', B) + f(A, B')$). \mathcal{U} est un voisinage ouvert de \mathcal{V} dans $GL_d(\mathbb{C})^2$. De plus, \mathcal{V} n'est pas affine ("plate") ce qui oblige à traiter les matrices A et B conjointement et posera des problèmes notamment dans la preuve de la Proposition 3.13.
5. \mathcal{V} est invariante par les transformations

$$\begin{aligned} (A, B) &\longrightarrow (B, A) \\ (A, B) &\longrightarrow (AU, BU) \text{ avec } U \in U_d(\mathbb{C}), \\ (A, B) &\longrightarrow (P^t AP, P^t BP) \text{ avec } P \in O_d(\mathbb{R}), \\ (A, B) &\longrightarrow (\lambda A, \bar{\lambda}^{-1} B) \text{ avec } \lambda \in \mathbb{C}^*, \\ (A, B) &\longrightarrow (DA, D^{t-1} B) \text{ avec } D \in GL_d(\mathbb{R}), \\ (A, B) &\longrightarrow (A, B + iSA) \text{ avec } S \in \text{Sym}_d(\mathbb{R}), \end{aligned}$$

en particulier \mathcal{V} est connexe par arcs

$$\begin{aligned} (A, B) &\rightarrow (AU_A = |A| \in \text{Herm}_d^{++}(\mathbb{C}), B_1) \rightarrow (P^t |A| P = D \in \text{Diag}_d^{++}(\mathbb{R}), B_2) \rightarrow \\ &(I, B_3 \in I + i\text{Sym}_d(\mathbb{R})) \rightarrow (I, I) \end{aligned}$$

et non compacte. Ce dernier point joue un rôle important, notamment dans les résultats de "spreading" (cf. [CombRobert97]) et dans la nécessité de contrôler la dynamique associée à ce couple de matrices dans des situations de presque croisement (voir le Chapitre 5).

6. \mathcal{U} est invariante par les transformations

$$\begin{aligned} (A, B) &\longrightarrow (B, A) \\ (A, B) &\longrightarrow (QAP, Q^{*-1}BP) \text{ avec } (Q, P) \in GL_d(\mathbb{C}) \times GL_d(\mathbb{C}), \\ (A, B) &\longrightarrow (A, B + iHA) \text{ avec } H \in \text{Herm}_d(\mathbb{C}), \end{aligned}$$

en particulier \mathcal{U} est connexe par arcs

$$\begin{aligned} (A, B) &\rightarrow (I, BA^{-1} \in \text{Herm}_d^{++}(\mathbb{C})) \rightarrow \\ &(I, U^* BA^{-1} U = D + iS \in \text{Diag}_d^{++}(\mathbb{R}) + i\text{Herm}_d(\mathbb{C})) \rightarrow (I, D \in \text{Diag}_d^{++}(\mathbb{R})) \rightarrow (I, I) \end{aligned}$$

et non compacte.

3.1.2 Relations de commutation

En utilisant que pour $v, w \in \mathbb{C}^d$,

$$[\langle v, x - a \rangle, \langle w, p_{\hbar, x} - \eta \rangle] = i\hbar \langle v, \bar{w} \rangle,$$

(c'est une formulation du principe d'incertitude d'Heisenberg) on obtient les relations de commutation suivantes

Proposition 3.1 *Pour $v, w \in \mathbb{C}^d$, on a, si $(A, B) \in \mathcal{V}$,*

$$[\mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v), \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, w)] = 0 \quad (3.3)$$

$$[\mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v)^*, \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, w)^*] = 0 \quad (3.4)$$

$$[\mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v), \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, w)^*] = \langle v, w \rangle. \quad (3.5)$$

Preuve On a, en omettant les paramètres A, B, \hbar, a, η ,

$$\begin{aligned} [\mathcal{A}(v), \mathcal{A}(w)] &= \frac{i}{2\hbar} ([\langle \bar{B}v, x - a \rangle, \langle \bar{A}w, p_{\hbar, x} - \eta \rangle] - [\langle \bar{B}w, x - a \rangle, \langle \bar{A}v, p_{\hbar, x} - \eta \rangle]) \\ &= - \left\langle w, \frac{A^t B - B^t A}{2} \bar{v} \right\rangle, \\ [\mathcal{A}(v)^*, \mathcal{A}(w)^*] &= - [\mathcal{A}(v), \mathcal{A}(w)]^* \\ &= \left\langle \frac{A^t B - B^t A}{2} \bar{v}, w \right\rangle, \\ [\mathcal{A}(v), \mathcal{A}(w)^*] &= -\frac{i}{2\hbar} ([\langle \bar{B}v, x - a \rangle, \langle A\bar{w}, p_{\hbar, x} - \eta \rangle] + [\langle B\bar{w}, x - a \rangle, \langle \bar{A}v, p_{\hbar, x} - \eta \rangle]) \\ &= \left\langle \bar{w}, \frac{A^* B + B^* A}{2} \bar{v} \right\rangle. \end{aligned}$$

□

3.1.3 Opérateurs de multiplications et de dérivations

On peut récupérer les opérateurs $\langle v, x - a \rangle$ et $\langle v, p_{\hbar, x} - \eta \rangle$ (et donc tout opérateur différentiel à coefficients polynômiaux) par les formules

Proposition 3.2 *Pour $v \in \mathbb{C}^d$, on a si $(A, B) \in \mathcal{V}$*

$$\langle v, x - a \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, A^t \bar{v})^* + \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, A^t v)) \quad (3.6)$$

$$\langle v, p_{\hbar, x} - \eta \rangle = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, B^t \bar{v})^* - \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, B^t v)). \quad (3.7)$$

Preuve On a, pour $v_1, v_2 \in \mathbb{C}^d$ (toujours en omettant les paramètres A, B, \hbar, a, η),

$$\mathcal{A}(v_1)^* + \mathcal{A}(v_2) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\langle B\bar{v}_1 + \bar{B}v_2, x - a \rangle + i\langle -A\bar{v}_1 + \bar{A}v_2, p_{\hbar, x} - \eta \rangle).$$

On cherche alors v_1 et v_2 tels que

$$\begin{pmatrix} B & \bar{B} \\ -A & \bar{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{v}_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2v \\ 0 \end{pmatrix} \text{ respectivement } \begin{pmatrix} 0 \\ 2v \end{pmatrix}$$

d'où, en multipliant à gauche par la matrice inversible (car inverse de la précédente comme on le voit ci-dessous)

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} A^* & -B^* \\ A^t & B^t \end{pmatrix},$$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} A^*B + B^*A & \overline{A^tB - B^tA} \\ A^tB - B^tA & A^*B + B^*A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{v}_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^*v \\ A^tv \end{pmatrix} \text{ respectivement } \begin{pmatrix} -B^*v \\ B^tv \end{pmatrix}.$$

□

3.2 Fonctions de Hermite

Dans cette section, on construit une base hilbertienne de fonctions à comportement gaussien qui possèdent des propriétés particulièrement agréables vis-à-vis des opérateurs de création et d'annihilation, de multiplication par des polynômes et de dérivation et qui sont bien localisées en espace et en impulsion (*i.e.* leurs transformées de Fourier sont bien localisées). Ces fonctions qui sont des paquets d'onde gaussiens feront l'objet d'un usage intensif dans les Chapitres 4 et 5, elles correspondent, pour un système moléculaire, au traitement semiclassique des noyaux qu'on considérera localisés autour de leur position donnée par la mécanique classique (ce point sera approfondi au début du Chapitre 4).

3.2.1 Définitions

Définition 3.2 Soient $A, B \in GL_d(\mathbb{C})$, $\hbar > 0$, $a, \eta \in \mathbb{R}^d$. Pour $x \in \mathbb{R}^d$, on pose

$$\varphi_0(A, B, \hbar, a, \eta, x) = \frac{(\det A)^{-1/2}}{(\pi\hbar)^{d/4}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \frac{\langle x - a, BA^{-1}(x - a) \rangle}{2} + \frac{i}{\hbar} \langle \eta, x - a \rangle\right) \quad (3.8)$$

(où le signe de la racine carrée complexe sera précisé ultérieurement). A partir d'ici on peut choisir une base orthonormée quelconque de \mathbb{R}^d , mais pour plus de simplicité on poursuivra cet exposé avec la base canonique qu'on notera (e_1, \dots, e_d) . On pose alors, pour $j = 1, \dots, d$

$$\mathcal{A}_j(A, B, \hbar, a, \eta) = \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, e_j).$$

Puis, en adoptant la notation multi-indicielle standard, on définit pour tout multi-indice $l = (l_1, \dots, l_d) \in \mathbb{N}^d$ la fonction

$$\varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) = \frac{\mathcal{A}_1(A, B, \hbar, a, \eta)^{*l_1} \dots \mathcal{A}_d(A, B, \hbar, a, \eta)^{*l_d}}{\sqrt{l!}} \varphi_0(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot). \quad (3.9)$$

Pour simplifier les notations, on conviendra que $\varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) = 0$ pour $l \in \mathbb{Z}^d - \mathbb{N}^d$ et on posera aussi

$$\psi_l(A, B, y) = \varphi_l(A, B, 1, 0, 0, y).$$

Remarque 3.2 Si $(A, B) \in \mathcal{U}$, tous les $\varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot)$ appartiennent à la classe de Schwartz.

3.2.2 Actions des opérateurs de création et d'annihilation

On a les résultats suivants, où on a posé, $1_j = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0) \in \mathbb{N}^d$ avec le 1 à la j^e position pour $j \in \{1, \dots, d\}$,

Proposition 3.3 *Pour $l \in \mathbb{N}^d$ et $j \in \{1, \dots, d\}$, on a si $(A, B) \in \mathcal{V}$ et en omettant les paramètres A, B, \hbar, a, η ,*

$$\mathcal{A}_j^* \varphi_l = \sqrt{l_j + 1} \varphi_{l+1_j} \quad (3.10)$$

$$\mathcal{A}_j \varphi_l = \sqrt{l_j} \varphi_{l-1_j} \quad (3.11)$$

$$\mathcal{A}_j^* \mathcal{A}_j \varphi_l = l_j \varphi_l \quad (3.12)$$

$$\mathcal{A}_j \mathcal{A}_j^* \varphi_l = (l_j + 1) \varphi_l. \quad (3.13)$$

Remarques 3.3

1. Cette proposition donne tout leur sens aux appellations données en Définition 3.1.
2. On dispose ainsi du spectre conjoint des opérateurs $\mathcal{A}_j^* \mathcal{A}_j$ pour $j = 1, \dots, d$.
3. L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique d -dimensionnel s'exprime ainsi en fonction des opérateurs de création et d'annihilation

$$-\frac{\hbar^2}{2} \Delta_x + \frac{\|x\|^2}{2} = \hbar \sum_{j=1}^d \frac{\mathcal{A}_j \mathcal{A}_j^* + \mathcal{A}_j^* \mathcal{A}_j}{2} (Id, Id, \hbar, 0, 0).$$

Preuve On a

1. d'après (3.5), $[\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_j^*] = 1$, donc $[\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_j^{*l_j}] = l_j \mathcal{A}_j^{*(l_j-1)}$;
2. pour $v \in \mathbb{C}^d$,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(v) \varphi_0 &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\langle v, B^t(x-a) \rangle - \langle v, A^t \nabla_x \rangle \left(\frac{\langle x-a, BA^{-1}(x-a) \rangle}{2} \right) \right) \varphi_0 \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left\langle v, \frac{A^t B - B^t A}{2} A^{-1}(x-a) \right\rangle \varphi_0 \quad ; \end{aligned}$$

3. pour (3.10), avec (3.4)

$$\mathcal{A}_j^* \varphi_l = \frac{1}{\sqrt{l!}} \mathcal{A}_1^{*l_1} \dots \mathcal{A}_j^{*(l_j+1)} \dots \mathcal{A}_d^{*l_d} \varphi_0 = \sqrt{l_j + 1} \varphi_{l+1_j} \quad ;$$

4. pour (3.11), avec (3.5)

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_j \varphi_l &= \frac{1}{\sqrt{l!}} \mathcal{A}_1^{*l_1} \dots \mathcal{A}_j \mathcal{A}_j^{*l_j} \dots \mathcal{A}_d^{*l_d} \varphi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{l!}} \mathcal{A}_1^{*l_1} \dots [\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_j^{*l_j}] \dots \mathcal{A}_d^{*l_d} \varphi_0 + \frac{1}{\sqrt{l!}} \mathcal{A}_1^{*l_1} \dots \mathcal{A}_d^{*l_d} \mathcal{A}_j \varphi_0 \\ &= \sqrt{l_j} \varphi_{l-1_j} \quad ; \end{aligned}$$

5. pour (3.12), avec (3.10) et (3.11)

$$\mathcal{A}_j^* \mathcal{A}_j \varphi_l = \mathcal{A}_j^* \sqrt{l_j} \varphi_{l-1_j} = \sqrt{(l_j - 1) + 1} \sqrt{l_j} \varphi_l = l_j \varphi_l \quad ;$$

6. pour (3.13), avec (3.5)

$$\mathcal{A}_j^* \mathcal{A}_j \varphi_l = (\mathcal{A}_j^* \mathcal{A}_j + [\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_j^*]) \varphi_l = (l_j + 1) \varphi_l.$$

□

3.2.3 Dualité et localisation dans l'espace des phases

On va ici mettre en évidence que la matrice A gère la forme du paquet d'onde et que la matrice B joue un rôle dual en Fourier.

Définition 3.3 On définit la transformée de Fourier \hbar -normalisée par

$$(\mathcal{F}_\hbar \psi)(\xi) = (2\pi\hbar)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{i}{\hbar}\langle \xi, x \rangle} \psi(x) dx$$

et on rappelle que c'est un opérateur unitaire sur $L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$.

Lemme 3.4 Pour $v \in \mathbb{C}^d$,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\hbar \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v) \mathcal{F}_\hbar^{-1} &= i \mathcal{A}(B, A, \hbar, \eta, -a, v) \\ \mathcal{F}_\hbar \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v)^* \mathcal{F}_\hbar^{-1} &= -i \mathcal{A}(B, A, \hbar, \eta, -a, v)^*. \end{aligned}$$

Preuve On a, pour $v \in \mathbb{C}^d$,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\hbar \langle v, x - a \rangle &= -\langle v, p_{\hbar, \xi} + a \rangle \mathcal{F}_\hbar \\ \mathcal{F}_\hbar \langle v, p_{\hbar, x} - \eta \rangle &= \langle v, \xi - \eta \rangle \mathcal{F}_\hbar. \end{aligned}$$

D'où

$$\mathcal{F}_\hbar \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v) = \frac{-\langle \overline{B}v, p_{\hbar, \xi} + a \rangle + i \langle \overline{A}v, \xi - \eta \rangle}{\sqrt{2\hbar}} \mathcal{F}_\hbar = i \mathcal{A}(B, A, \hbar, \eta, -a, v) \mathcal{F}_\hbar,$$

et on conclut en utilisant que $\mathcal{F}_\hbar^* = \mathcal{F}_\hbar^{-1}$. \square

Proposition 3.5 Pour $l \in \mathbb{N}^d$, on a si $(A, B) \in \mathcal{V}$

$$(\mathcal{F}_\hbar \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot))(\xi) = (-i)^{|l|} e^{-\frac{i}{\hbar}\langle a, \eta \rangle} \varphi_l(B, A, \hbar, \eta, -a, \xi). \quad (3.14)$$

Remarques 3.4

1. Si $(A, B) \in \mathcal{V}$, on a

$$|\varphi_0(A, B, \hbar, a, \eta, x)| = (\pi\hbar)^{-d/4} |\det A|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \frac{\| |A|^{-1}(x-a) \|^2}{2}\right)$$

si bien que les lignes de niveaux de $|\varphi_0|$ sont celles de $\| |A|^{-1}(x-a) \|^2$ i.e. centrée en a et toutes homothètes entre elles. De même, par la Proposition 3.5, celles de $|\mathcal{F}_\hbar \varphi_0|$ sont celles de $\| |B|^{-1}(\xi - \eta) \|^2$. Finalement, on voit que φ_0 est localisée en (a, η) dans l'espace des phases avec un rayon caractéristique d'ordre \hbar .

2. En toute généralité sur (A, B) , la proposition est fautive (notamment sur \mathcal{U}) mais elle reste valable si $f(A, B) \in \{0\} \times \text{Herm}_d^{++}(\mathbb{C})$.

Preuve On commence par l'établir pour $|l| = 0$ puis on utilisera le lemme précédent pour conclure par récurrence sur $|l|$.

1. On énonce d'abord le lemme suivant

Lemme 3.6 Soit $M \in \text{Sym}_d(\mathbb{C})$ de partie réelle définie positive, alors il existe un choix de la racine carrée du déterminant telle qu'on a

$$\mathcal{F}_{1/2\pi}(e^{-\pi\langle \cdot, M \cdot \rangle})(\xi) = (\det M)^{-1/2} e^{-\pi\langle \xi, M^{-1} \xi \rangle}. \quad (3.15)$$

Preuve du lemme cf. Annexe A.1. □

Ainsi,

$$\begin{aligned}
& (\mathcal{F}_\hbar \varphi_0(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot))(\xi) \\
&= (\pi \hbar)^{-d/4} (\det A)^{-1/2} e^{-\frac{i}{\hbar} \langle \xi, a \rangle} \mathcal{F}_{1/2\pi}(e^{-\pi \langle \cdot, BA^{-1} \cdot \rangle})((2\pi \hbar)^{-1/2}(\xi - \eta)) \\
&= (\pi \hbar)^{-d/4} (\det B)^{-1/2} e^{-\frac{i}{\hbar} \langle \xi, a \rangle} e^{-\frac{1}{\hbar} \frac{\langle (\xi - \eta), AB^{-1}(\xi - \eta) \rangle}{2}} \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar} \langle a, \eta \rangle} \varphi_0(B, A, \hbar, \eta, -a, \xi).
\end{aligned}$$

2. On suppose le résultat vrai pour l et on va le montrer pour $l + 1_j$,

$$\begin{aligned}
& (\mathcal{F}_\hbar \varphi_{l+1_j}(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot))(\xi) \\
&= (\mathcal{F}_\hbar \frac{1}{\sqrt{l_j + 1}} \mathcal{A}_j(A, B, \hbar, a, \eta)^* \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot))(\xi) \\
&= -i \left(\frac{1}{\sqrt{l_j + 1}} \mathcal{A}_j(B, A, \hbar, \eta, -a)^* \mathcal{F}_\hbar \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) \right)(\xi) \\
&= (-i)^{|l|+1} e^{-\frac{i}{\hbar} \langle a, \eta \rangle} \left(\frac{1}{\sqrt{l_j + 1}} \mathcal{A}_j(B, A, \hbar, \eta, -a)^* \varphi_l(B, A, \hbar, \eta, -a, \cdot) \right)(\xi) \\
&= (-i)^{|l+1_j|} e^{-\frac{i}{\hbar} \langle a, \eta \rangle} \varphi_{l+1_j}(B, A, \hbar, \eta, -a, \xi).
\end{aligned}$$

□

3.2.4 Translation du point de localisation dans l'espace des phases

La proposition qui va suivre permet de mieux comprendre la dépendance en (a, η) et en \hbar de nos paquets d'onde.

Définition 3.4 Soient $u \in \mathbb{R}^d$, $\varepsilon > 0$ et $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$, on définit les opérateurs de translation τ^u , de déphasage μ^u et de dilatation Λ_ε par

$$(\tau^u f)(x) = f(x + u), \quad (\mu^u f)(x) = e^{i \langle u, x \rangle} f(x), \quad (\Lambda_\varepsilon f)(x) = \varepsilon^{-d/4} f\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}\right).$$

Remarque 3.5 Les opérateurs τ^u , μ^u et Λ_ε sont bornés et se prolongent donc par continuité à $L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$. De plus, on a les relations

$$\begin{aligned}
\tau^0 &= Id, & \tau^u \tau^v &= \tau^v \tau^u = \tau^{u+v}, & (\tau^u)^* &= \tau^{-u} = (\tau^u)^{-1} \\
\mu^0 &= Id, & \mu^u \mu^v &= \mu^v \mu^u = \mu^{u+v}, & (\mu^u)^* &= \mu^{-u} = (\mu^u)^{-1} \\
\Lambda_1 &= Id, & \Lambda_\varepsilon \Lambda_{\varepsilon'} &= \Lambda_{\varepsilon'} \Lambda_\varepsilon = \Lambda_{\varepsilon \varepsilon'}, & (\Lambda_\varepsilon)^* &= \Lambda_{\varepsilon^{-1}} = (\Lambda_\varepsilon)^{-1}.
\end{aligned}$$

En particulier, ce sont des opérateurs unitaires. Enfin, on a

$$\mathcal{F}_\hbar \tau^u \mathcal{F}_\hbar^{-1} = \mu^{u/\hbar}, \quad \mathcal{F}_\hbar \mu^u \mathcal{F}_\hbar^{-1} = \tau^{-\hbar u} \quad \mathcal{F}_\hbar \Lambda_\varepsilon \mathcal{F}_\hbar^{-1} = \Lambda_{\varepsilon^{-1}}.$$

Proposition 3.7 Pour $(A, B) \in \mathcal{U}$, on a

$$\begin{aligned}
\tau^u \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) &= \varphi_l(A, B, \hbar, a - u, \eta, \cdot), \\
\mu^u \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) &= e^{i \langle u, a \rangle} \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta + \hbar u, \cdot). \\
\Lambda_\varepsilon \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) &= \varphi_l(A, B, \hbar \varepsilon, a \sqrt{\varepsilon}, \eta \sqrt{\varepsilon}, \cdot).
\end{aligned}$$

En particulier, on a donc

$$\Lambda_{\hbar^{-1}} \mu^{-\eta/\hbar} \tau^a \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) = \psi_l(A, B, \cdot)$$

c'est-à-dire

$$\varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, x) = \hbar^{-d/4} e^{\frac{i}{\hbar} \langle \eta, x-a \rangle} \psi_l \left(A, B, \frac{x-a}{\sqrt{\hbar}} \right).$$

Preuve On raisonne par récurrence sur $|l|$.

1. Le cas $|l| = 0$ est évident d'après la formule (3.8).
2. On va utiliser le lemme suivant

Lemme 3.8 *Pour $v \in \mathbb{C}^d$, on a*

$$\begin{aligned} \tau^u \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v)^* (\tau^u)^{-1} &= \mathcal{A}(A, B, \hbar, a-u, \eta, v)^* \\ \mu^u \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v)^* (\mu^u)^{-1} &= \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta + \hbar u, v)^* \\ \Lambda_\varepsilon \mathcal{A}(A, B, \hbar, a, \eta, v)^* (\Lambda_\varepsilon)^{-1} &= \mathcal{A}(A, B, \hbar \varepsilon, a\sqrt{\varepsilon}, \eta\sqrt{\varepsilon}, v)^*. \end{aligned}$$

On a

$$\begin{aligned} \tau^u \varphi_{l+1_j}(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) &= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}} \tau^u \mathcal{A}_j(A, B, \hbar, a, \eta)^* \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) \\ &= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}} \mathcal{A}_j(A, B, \hbar, a-u, \eta)^* \tau^u \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot) \\ &= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}} \mathcal{A}_j(A, B, \hbar, a-u, \eta)^* \varphi_l(A, B, \hbar, a-u, \eta, \cdot) \\ &= \varphi_{l+1_j}(A, B, \hbar, a-u, \eta, \cdot) \end{aligned}$$

et on procède de manière tout à fait analogue pour les deux autres égalités. \square

3.2.5 Polynômes de Hermite généralisés

On cherche ici à comprendre la dépendance en (A, B) de nos paquets d'onde. On va mettre en évidence que ceux-ci se décomposent en une partie purement gaussienne et une partie polynômiale qui ne dépend que de la matrice A .

On pose, pour $U \in U_d(\mathbb{C})$, $\mathcal{B}_j(U)^* = 2\mathcal{A}_j \left(\sqrt{2}U, \frac{U}{\sqrt{2}}, 1, 0, 0 \right)^* = \langle Ue_j, 2y - \nabla y \rangle$.

Proposition 3.9 *Pour tout multi-indice $l \in \mathbb{N}^d$, on a si $(A, B) \in \mathcal{V}$ et si on a noté $A = |A|U_A$ la décomposition polaire de A ,*

$$\varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, x) = \frac{1}{\sqrt{2^{|l|} l!}} H_l \left(U_A, |A|^{-1} \frac{x-a}{\sqrt{\hbar}} \right) \varphi_0(A, B, \hbar, a, \eta, x) \quad (3.16)$$

où $H_l(U, y)$ est un polynôme de degré $|l|$ en y qui vérifie la relation suivante :

$$\begin{cases} H_0(U, \cdot) &= 1 \\ H_l(U, \cdot) &= \mathcal{B}_1(U)^{*l_1} \dots \mathcal{B}_d(U)^{*l_d} H_0(U, \cdot). \end{cases} \quad (3.17)$$

De plus, on a

$$H_l(U, y) = 2^{|l|} \langle Ue_1, y \rangle^{l_1} \dots \langle Ue_d, y \rangle^{l_d} + R_l(U, y)$$

où $R_l(U, y)$ est un polynôme en y de degré au plus $|l| - 2$. Plus précisément $H_l(U, \cdot)$ possède la parité de $|l|$.

Remarques 3.6

1. Pour $U \in U_d(\mathbb{C})$ fixé, $(H_l(U, Y))_{l \in \mathbb{N}^d}$ est une base de $\mathbb{C}[Y_1, \dots, Y_d]$.
2. Pour $d = 1$, on a $H_l(U, Y) = \bar{U}^l H_l(Y)$ où $H_l(Y)$ sont les polynômes de Hermite usuels définis par

$$H_l(y) = (-1)^l e^{y^2} \frac{d^l}{dy^l} (e^{-y^2}).$$

3. Pour U diagonale de coefficients diagonaux (de module 1) u_j , on a

$$H_l(U, Y) = \prod_{j=1}^d (\bar{u}_j^{l_j} H_{l_j}(Y_j)).$$

Preuve On raisonne bien sûr par récurrence sur $|l|$ et on pose $y = |A|^{-1} \frac{x-a}{\sqrt{\hbar}}$.

1. Le cas $|l| = 0$ étant évident, on traite d'abord le cas $|l| = 1$ (on a omis les paramètres A, B, \hbar, a, η)

$$\begin{aligned} \langle v, p_{\hbar, x} - \eta \rangle \varphi_0(x) &= - \left[\langle v, p_{\hbar, x} \rangle \left(\frac{\langle x - a, BA^{-1}(x - a) \rangle}{2\hbar} \right) \right] \varphi_0(x) \\ &= i \left\langle v, \frac{BA^{-1} + (BA^{-1})^t}{2} (x - a) \right\rangle \varphi_0(x), \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} \varphi_{1_j}(x) &= \mathcal{A}_j^* \varphi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\langle e_j, B^*(x - a) \rangle + \left\langle Ae_j, \frac{BA^{-1} + (BA^{-1})^t}{2} (x - a) \right\rangle \right) \varphi_0(x) \\ &= \sqrt{2} \left\langle e_j, \left(\frac{A^*B + B^*A}{2} - (\bar{A}^{-1}A)^* \frac{A^tB - B^tA}{4} \right) U_A^* y \right\rangle \varphi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathcal{B}_j(U_A)^* H_0(U_A, y)] \varphi_0(x). \end{aligned}$$

2. Voyons maintenant comment on construit $H_{l+1_j}(U_A, y)$ à partir de $H_l(U_A, y)$

$$\begin{aligned} \varphi_{l+1_j} &= \frac{1}{\sqrt{l_j + 1}} \mathcal{A}_j^* \varphi_l \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{|l|} (l + 1_j)!}} \left[H_l(U_A, y) \mathcal{A}_j^* - \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left\langle Ae_j, \nabla_x H_l \left(U_A, |A|^{-1} \frac{x - a}{\sqrt{\hbar}} \right) \right\rangle \right] \varphi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{|l|+1} (l + 1_j)!}} \langle U_A e_j, 2y H_l(U_A, y) - \nabla_y H_l(U_A, y) \rangle \varphi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{|l+1_j|} (l + 1_j)!}} [\mathcal{B}_j(U_A)^* H_l(U_A, y)] \varphi_0. \end{aligned}$$

3. La dernière assertion se vérifie aisément à partir de la relation (3.17).

□

3.2.6 Bases orthonormées de $L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$

Le théorème ci-dessous légitime le fait de s'intéresser à des conditions initiales de la forme de nos paquets d'onde puisque les équations de Schrödinger qui nous intéressent sont exclusivement linéaires et qu'une superposition de paquets d'onde est alors toujours possible pourvu qu'on dispose d'un contrôle des estimations quand le multi-indice l tend vers l'infini (voir les Remarques 3.16 pour des commentaires supplémentaires autour de la superposition).

Théorème 3.10 *On se donne A, B, \hbar, a, η tels que $(A, B) \in \mathcal{V}$, $\hbar > 0$ et $a, \eta \in \mathbb{R}^d$, alors $(\varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot))_{l \in \mathbb{N}^d}$ est une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$.*

Preuve Dans toute la preuve, on omettra les paramètres A, B, \hbar, a, η .

1. Voyons d'abord l'orthogonalité, soient $l, m \in \mathbb{N}^d$ tels que $l \neq m$ et soit alors $j \in \{1, \dots, d\}$ tel que $l_j \neq m_j$. On a

$$\sqrt{l_j} \langle \varphi_l, \varphi_m \rangle = \langle \mathcal{A}_j^* \varphi_{l-1_j}, \varphi_m \rangle = \langle \varphi_{l-1_j}, \mathcal{A}_j \varphi_m \rangle = \sqrt{m_j} \langle \varphi_{l-1_j}, \varphi_{m-1_j} \rangle$$

en particulier en permutant l et m ,

$$(l_j - m_j) \langle \varphi_l, \varphi_m \rangle = 0$$

et l'orthogonalité voulue.

2. On va maintenant voir par récurrence sur $|l|$ que $\|\varphi_l\| = 1$. Le calcul suivant donne le résultat pour $|l| = 0$ (on effectue le changement de variable $y = |A|^{-1} \frac{x-a}{\sqrt{\hbar}}$),

$$\begin{aligned} \|\varphi_0\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} (\pi \hbar)^{-d/2} |\det A|^{-1} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \langle x-a, \Re(BA^{-1})(x-a) \rangle\right) dx \\ &= \pi^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \exp(-\|y\|^2) dy = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-r^2} dr\right)^d = 1. \end{aligned}$$

On montre alors que le résultat pour $l+1_j$ se déduit de celui pour l

$$\|\varphi_{l+1_j}\|^2 = \frac{1}{l_j+1} \langle \mathcal{A}_j^* \varphi_l, \mathcal{A}_j^* \varphi_l \rangle = \frac{1}{l_j+1} \langle \varphi_l, \mathcal{A}_j \mathcal{A}_j^* \varphi_l \rangle = \|\varphi_l\|^2.$$

3. Pour la complétude, on va se ramener au cas des fonctions de Hermite classiques unidimensionnelles qui sont traitées dans [KolFomine74]. On commence donc par effectuer le changement de variable $y = |A|^{-1} \frac{x-a}{\sqrt{\hbar}}$ et éliminer la phase de la gaussienne qui n'influe pas sur la complétude. On voit ensuite qu'on peut séparer les variables et utiliser le premier point des Remarques 3.6 pour se ramener au cas unidimensionnel. On conclut enfin par isomorphie de $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})^{\otimes d}$ et $L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$.

□

3.2.7 Actions itérées des opérateurs de multiplications et dérivations sur la “base de Hermite”

Les résultats qui suivent ne seront pas pleinement utilisés par la suite, on retiendra essentiellement les identités (3.18)-(3.20) qui serviront au début du Chapitre 5 et le fait que les quantités $M_{l,m,j}(A, B)$ définies ci-dessous servent pour raffiner les solutions et obtenir des résultats de plus en plus précis (cf. dernier point des Remarques 3.16).

On pose, pour $(A, B) \in \mathcal{V}$ et $l, m, j \in \mathbb{N}^d$,

$$\begin{aligned} M_{l,m,j}(A, B) &= \langle \psi_l(A, B, \cdot), y^m \psi_j(A, B, \cdot) \rangle \\ D_{l,m,j}(A, B) &= \langle \psi_l(A, B, \cdot), p_{1,y}^m \psi_j(A, B, \cdot) \rangle \end{aligned}$$

où on rappelle que $p_{1,y} = -i\nabla_y$.

Remarque 3.7 On a

$$\begin{aligned} \langle \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, x), (x-a)^m \varphi_j(A, B, \hbar, a, \eta, x) \rangle &= \hbar^{m/2} M_{l,m,j}(A, B) \\ \langle \varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, x), (p_{\hbar,x} - \eta)^m \varphi_j(A, B, \hbar, a, \eta, x) \rangle &= \hbar^{m/2} D_{l,m,j}(A, B). \end{aligned}$$

Proposition 3.11 Pour $(A, B) \in \mathcal{V}$ et $l, m, j \in \mathbb{N}^d$,

1. $D_{l,m,j}(A, B) = i^{|l|-|j|} M_{l,m,j}(B, A)$,
2. $M_{l,m,j}(A, B)$ est indépendant de B ($D_{l,m,j}(A, B)$ est indépendant de A),
3. $M_{l,m,j}(A, B) = 0$ si $|m| - |l - j|$ est strictement négatif ou impair,
4. $M_{l,1_k,j}(A, B) = \begin{cases} \sqrt{\frac{l_p+1}{2}} \langle e_p, A^t e_k \rangle & \text{si } j = l + 1_p \\ \sqrt{\frac{l_p}{2}} \langle A^t e_k, e_p \rangle & \text{si } j = l - 1_p \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$.

Remarque 3.8 Dans le cas $d = 1$, on peut représenter l'action des opérateurs $x - a$ et $p_{\hbar,x} - \eta$ sur la base ordonnée des $(\varphi_l(A, B, \hbar, a, \eta, \cdot))_{l \in \mathbb{N}}$ par les matrices infinies tridiagonales

$$\begin{aligned} x - a &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \overline{A}\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ A\sqrt{1} & 0 & \overline{A}\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & A\sqrt{2} & 0 & \overline{A}\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & A\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \\ p_{\hbar,x} - \eta &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\overline{B}\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ B\sqrt{1} & 0 & -\overline{B}\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & B\sqrt{2} & 0 & -\overline{B}\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & B\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Par ailleurs, on a aussi $M_{l,m,j}(A) = A^{(m+l-j)/2} \overline{A}^{(m+j-l)/2} M_{l,m,j}(1)$ et on pourra consulter le Théorème 4.1 de [Hagedorn98] pour une formule précise donnant $M_{l,m,j}(1)$. Dans la perspective du Chapitre 5, on donne ici certaines identités (on a omis les paramètres $(A, B, \hbar, a, \eta, x)$)

$$(x-a)\varphi_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} A\varphi_1, \quad (x-a)^2\varphi_0 = \frac{\hbar}{2} \left[|A|^2\varphi_0 + \sqrt{2}A^2\varphi_2 \right], \quad (3.18)$$

$$(x-a)^3\varphi_0 = \frac{\hbar^{3/2}}{4} \left[3\sqrt{2}A|A|^2\varphi_1 + 2\sqrt{3}A^3\varphi_2 \right], \quad (3.19)$$

$$(p_{\hbar,x} - \eta)\varphi_0 = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} B\varphi_1, \quad (p_{\hbar,x} - \eta)^2\varphi_0 = \frac{\hbar}{2} \left[|B|^2\varphi_0 - \sqrt{2}B^2\varphi_2 \right]. \quad (3.20)$$

Preuve

1. Avec la Proposition 3.5, on a

$$\begin{aligned} D_{l,m,j}(A, B) &= \langle \mathcal{F}_1 \psi_l(A, B, \cdot), \mathcal{F}_1(p_{1,y}^m \psi_j(A, B, \cdot)) \rangle \\ &= \langle (-i)^{|l|} \psi_l(B, A, \cdot), \xi^m (-i)^{|j|} \psi_j(B, A, \cdot) \rangle \\ &= i^{|l|-|j|} \langle \psi_l(B, A, \cdot), \xi^m \psi_j(B, A, \cdot) \rangle \quad ; \end{aligned}$$

2. Avec la Proposition 3.9, on a

$$\begin{aligned} M_{l,m,j}(A, B) &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2^{|l|+|l|!}}} H_l(U_A, |A|^{-1}y) \psi_0(A, B, y), \frac{y^m}{\sqrt{2^{|j|+|j|!}}} H_j(U_A, |A|^{-1}y) \psi_0(A, B, y) \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{|l|+|j|+|l|!j!}}} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{H_l(U_A, |A|^{-1}y)} y^m H_j(U_A, |A|^{-1}y) |\psi_0(A, B, y)|^2 dy \\ &= \frac{\pi^{-d/4} |\det A|^{-1/2}}{\sqrt{2^{|l|+|j|+|l|!j!}}} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{H_l(U_A, |A|^{-1}y)} y^m H_j(U_A, |A|^{-1}y) e^{-\frac{1}{2} \| |A|^{-1}y \|^2} dy \\ &= \frac{\pi^{-d/4} |\det A|^{-1/2}}{\sqrt{2^{|l|+|j|+|l|!j!}}} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{H_l(U_A, z)} (|A|z)^m H_j(U_A, z) e^{-\|z\|^2/4} dz \end{aligned}$$

qui ne dépend bien que de A ;

3. On raisonne par récurrence sur $|m|$. Pour $|m| = 0$, c'est évident, montrons donc le résultat pour $m + 1_k$ avec $k = 1, \dots, d$ en le supposant vrai pour m . On a

$$M_{l,m+1_k,j}(A) = \langle \psi_l(A, B, y), y_k y^m \psi_j(A, B, y) \rangle = \langle y_k \psi_l(A, B, y), y^m \psi_j(A, B, y) \rangle,$$

or, par (3.6),

$$\begin{aligned} y_k \psi_l(A, B, y) &= \langle e_k, y \rangle \psi_l(A, B, y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{A}(A^t e_k)^* + \mathcal{A}(A^t e_k)) \psi_l(A, B, y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{p=1}^d (\langle e_p, A^t e_k \rangle \mathcal{A}_p^* + \langle A^t e_k, e_p \rangle \mathcal{A}_p) \psi_l(A, B, y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{p=1}^d \left(\langle e_p, A^t e_k \rangle \sqrt{l_p + 1} \psi_{l+1_p}(A, B, y) + \langle A^t e_k, e_p \rangle \sqrt{l_p} \psi_{l-1_p}(A, B, y) \right). \end{aligned}$$

Ainsi $M_{l,m+1_k,j}(A)$ est égal à

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{p=1}^d \left(\langle e_p, A^t e_k \rangle \sqrt{l_p + 1} M_{l+1_p,m,j}(A) + \langle A^t e_k, e_p \rangle \sqrt{l_p} M_{l-1_p,m,j}(A) \right). \quad (3.21)$$

Or, si $|m + 1_k| + |l - j| = |m| - |l - j| + 1$ est strictement négatif ou impair, $|m| - |l + 1_p - j| = |m| - |l - j| \pm 1$ et $|m| - |l - 1_p - j| = |m| - |l - j| \pm 1$ sont de même nature, ce qui permet de conclure ;

4. Cela découle de la formule (3.21). □

3.2.8 Produit scalaire de deux fonctions de Hermite

On dispose de deux résultats : les Propositions 4 et 7 de [HagRob98] et le Lemme 3.4 de [HagRob99]. On va rappeler l'énoncé du premier de ces résultats puisqu'on en aura besoin au Chapitre 5.

Proposition 3.12 *Soient $(A_j, B_j, \hbar, a_j, \eta_j) \in (\mathbb{C}^2 \times \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^2)$ tel que $\overline{A_j}B_j + \overline{B_j}A_j = 2$ (pour $j = 1, 2$) et $l, k \in \mathbb{N}$, alors on a*

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_l(A_1, B_1, \hbar, a_1, \eta_1, \cdot), \varphi_k(A_2, B_2, \hbar, a_2, \eta_2, \cdot) \rangle = \\ & \frac{\overline{A_1}^{-1/2} A_2^{-1/2}}{\sqrt{\overline{B_1}A_1^{-1} + B_2A_2^{-1}}} \frac{(\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2)^{-\frac{l+k}{2}}}{\sqrt{2^{l+k-1}l!k!}} \sum_{j=0}^{\min(l,k)} \left[C_l^j C_k^j j! 4^j \right. \\ & \times (A_1B_2 - B_1A_2)^{\frac{l-j}{2}} H_{l-j} \left(-\hbar^{-1/2} \frac{B_2(a_1 - a_2) + iA_2(\eta_1 - \eta_2)}{\sqrt{A_1B_2 - B_1A_2} \sqrt{\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2}} \right) \\ & \times (\overline{B_1}A_2 - \overline{A_1}B_2)^{\frac{k-j}{2}} H_{k-j} \left(\hbar^{-1/2} \frac{\overline{B_1}(a_1 - a_2) - i\overline{A_1}(\eta_1 - \eta_2)}{\sqrt{\overline{B_1}A_2 - \overline{A_1}B_2} \sqrt{\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2}} \right) \left. \right] \\ & \times \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \frac{[\overline{B_1}(a_1 - a_2) - i\overline{A_1}(\eta_1 - \eta_2)] [B_2(a_1 - a_2) + iA_2(\eta_1 - \eta_2)]}{2(\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2)} \right) \\ & \times \exp \left(\frac{i(\eta_1 + \eta_2)(a_1 - a_2)}{\hbar} \right). \end{aligned}$$

Remarques 3.9

1. Le membre de droite de l'égalité ne dépend que du choix des racines carrées complexes de $\overline{A_1}$ et A_2 (tout comme le membre de gauche).
2. La preuve que l'on propose ici nécessite le Corollaire 3.17 du Théorème 3.16.

Preuve cf. Annexe A.2. □

3.2.9 Variation des fonctions de Hermite avec les paramètres A, B et a

On donne ici deux résultats qui nous seront utiles au Chapitre 4 dans toute la Section 4.9 pour le premier et plus précisément en Section 4.9.2 pour le second.

Proposition 3.13 *Soit $(A_0, B_0) \in \mathcal{V}$ fixé, alors il existe un voisinage ouvert U de (A_0, B_0) dans \mathcal{V} tel que si $(A, B) \in U$, on a*

$$\|\varphi_l(A, B, \hbar, a, 0, \cdot) - \varphi_l(A_0, B_0, \hbar, a_0, 0, \cdot)\| = O \left(\|A - A_0\| + \|B - B_0\| + \frac{\|a - a_0\|}{\sqrt{\hbar}} \right)$$

dans $L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$.

Remarque 3.10 Ce résultat a déjà été énoncé dans [HagJoye98] (cf. Lemme 3.1) mais la preuve qui y est proposée n'est pas valide. En effet, l'idée de cette preuve est d'utiliser le fait que la matrice B n'intervient que dans la partie gaussienne du paquet d'onde et que la Proposition 3.5 échange le rôle de A et de B . Malheureusement, ces deux observations ne permettent pas de découpler le comportement en A et en B car les Propositions 3.5 et 3.9 ne sont valides que pour $(A, B) \in \mathcal{V}$ (ou une sous-variété légèrement plus grande mais en tout cas pas un ouvert) et même une variation infinitésimale de (A_0, B_0) du type $(A_0, B_0 + tB')$ ne reste pas sur la variété \mathcal{V} .

Preuve Dans le cas $d = 1$, il suffit d'effectuer des développements limités dans la formule explicite de la Proposition 3.12. Le cas général est moralement identique mais avec des calculs encore plus lourds que nous n'avons pas tenu à expliciter ici (!). \square

Proposition 3.14 Soient $(A, B) \in \mathcal{V}$ et $S \in \text{Sym}_d(\mathbb{R})$, alors pour tout $l \in \mathbb{N}^d$ et tout $y \in \mathbb{R}^d$, on a

$$\psi_l(A, B + iSA, y) = \exp\left(-i\frac{\langle y, Sy \rangle}{2}\right) \psi_l(A, B, y).$$

Remarque 3.11 $(A, B + iSA) \in \mathcal{V}$ conformément au cinquième point des Remarques 3.1

Preuve Le résultat est évident pour $|l| = 0$ et la Proposition 3.9 permet de traiter le cas général puisque la partie polynômiale ne dépend pas de la matrice B . \square

3.2.10 Troncature des fonctions de Hermite autour du point de localisation

Pour mieux mettre en valeur la localisation évoquée en Section 3.2.3, on va tronquer nos paquets d'onde en introduisant un deuxième paramètre $\gamma > 0$ de façon à conserver uniquement les points de la boule de rayon $2\sqrt{\hbar}/\gamma$ autour du point de localisation. On met ci-après en évidence le fait qu'en manipulant les paquets d'onde tronqués plutôt que ceux initiaux on commet une erreur exponentiellement petite en γ , donc en \hbar si on choisit γ comme une fonction de \hbar . Cette méthode de troncature est essentiellement technique dans les situations où il n'y a pas de croisement de niveaux comme mentionné dans le deuxième point des Remarques 3.16 et le premier des Remarques 4.1 du Chapitre 4. Par contre, elle s'avérera particulièrement cruciale en situation de presque croisement ou croisement aux Chapitres 4 (cf. Lemme 4.5) et 5 (cf. Section 5.3).

On se donne $F \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}; [0, 1])$ telle que $F(x) = 1$ pour $x \leq 1$ et $F(x) = 0$ pour $x \geq 2$. Pour $n \geq 0$, on note $M_n = \|(1 - F)^{(n)}\|_\infty$.

Par ailleurs, pour $n \geq 0$, $k \geq 0$ entiers, $\gamma \in]0, 1[$ et $(A, B) \in \mathcal{V}$, on pose

$$M_n^\gamma(k, A, B) = \max_{|l|=k} \|(1 - F)^{(n)}(\gamma\|y\|)\psi_l(A, B, y)\|_{L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})},$$

$$MD_n^\gamma(k, A, B) = \max_{|l|=k} \|(1 - F)^{(n)}(\gamma\|y\|)\nabla_y \psi_l(A, B, y)\|_{L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C}^d)}.$$

Proposition 3.15 Pour $n \geq 0$, $k \geq 0$ entiers, $\gamma \in]0, 1[$ et $(A, B) \in \mathcal{V}$, on a les majorations suivantes

$$M_n^\gamma(k, A, B) \leq \left(\sum_{j=0}^k C_k^j (\sqrt{2}\gamma\|A\|)^j M_{n+j} \right) \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \|A\| \right)^{d/2} \gamma^{d/2} e^{-d\|A\|^2 \gamma^{-2}/2}, \quad (3.22)$$

$$MD_n^\gamma(k, A, B) \leq d^2 \|B\| \sqrt{\frac{k+1}{2}} [M_n^\gamma(k+1, A, B) + M_n^\gamma(k-1, A, B)]. \quad (3.23)$$

De plus, il existe un choix particulier de F pour lequel il existe une constante $C > 0$ telle que

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad M_n \leq C \left(\frac{3n}{e} \right)^n n!. \quad (3.24)$$

Remarque 3.12 On précise ici explicitement la dépendance en k de l'estimation pour donner une idée du genre de résultat qu'on peut espérer obtenir en superposant des paquets d'onde (cf. quatrième point des Remarques 3.16).

Preuve cf. Annexe A.3. \square

3.3 Équation de Schrödinger avec hamiltonien quadratique

Le résultat fondamental de cette section est le Théorème 3.16 qui donne l'évolution en temps d'un paquet d'onde gaussien gouverné par une équation de Schrödinger avec hamiltonien quadratique en position et en impulsion.

3.3.1 Définition de l'hamiltonien et de l'équation de Schrödinger

Définition 3.5 *On se donne I un intervalle ouvert de \mathbb{R} , $t_0 \in I$, $\alpha, \gamma \in \mathcal{C}^0(I; \text{Sym}_d(\mathbb{R}))$, $\beta \in \mathcal{C}^0(I; \mathcal{M}_d(\mathbb{R}))$, $\lambda, \mu \in \mathcal{C}^0(I; \mathbb{R}^d)$ et $\nu \in \mathcal{C}^0(I; \mathbb{R})$. On considère alors l'hamiltonien quadratique $H[\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \mu, \nu](x, p, t)$ (où on a noté $(v, w) = \sum_{k=1}^d v_k w_k$ pour $v, w \in \mathbb{C}^d$) donné par*

$$\frac{1}{2} [(p, \alpha(t)p) + (p, \beta(t)x) + (\beta(t)x, p) + (x, \gamma(t)x)] + (\lambda(t), p) + (\mu(t), x) + \nu(t). \quad (3.25)$$

On cherche alors à résoudre l'équation de Schrödinger suivante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\hbar}(t, x) = H[\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \mu, \nu](x, p_{\hbar, x}, t) \psi_{\hbar}(t, x) \quad (3.26)$$

où l'hamiltonien est considéré comme opérateur agissant sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$.

3.3.2 Équations d'évolution des paramètres

On considère le système d'équations différentielles ordinaires suivant

$$\begin{cases} \dot{a}(t) &= \beta(t)a(t) + \alpha(t)\eta(t) + \lambda(t) \\ \dot{\eta}(t) &= -\gamma(t)a(t) - \beta^t(t)\eta(t) - \mu(t) \\ \dot{A}(t) &= \beta(t)A(t) + i\alpha(t)B(t) \\ \dot{B}(t) &= i\gamma(t)A(t) - \beta^t(t)B(t) \\ \dot{S}(t) &= \frac{1}{2}(\eta(t), \alpha(t)\eta(t)) - \frac{1}{2}(a(t), \gamma(t)a(t)) - (\mu(t), a(t)) - \nu(t). \end{cases} \quad (3.27)$$

La linéarité des deux premiers couples du système et le fait que la dernière équation soit résolue en S donnent bien sûr l'existence globale (sur tout I) de la solution associée à toute condition initiale $(a(t_0), \eta(t_0), A(t_0), B(t_0), S(t_0))$.

Remarque 3.13 On notera que si $(A(t_0), B(t_0)) \in \mathcal{V}$, les équations d'évolution et le fait que $\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \mu$ et ν soient à valeurs vectorielles réelles donnent que, pour tout temps t dans I , $(A(t), B(t)) \in \mathcal{V}$.

3.3.3 Résolution de l'équation

Théorème 3.16 *Soient $\alpha, \gamma \in \mathcal{C}^0(I; \text{Sym}_d(\mathbb{R}))$, $\beta \in \mathcal{C}^0(I; \mathcal{M}_d(\mathbb{R}))$, $\lambda, \mu \in \mathcal{C}^0(I; \mathbb{R}^d)$ et $\nu \in \mathcal{C}^0(I; \mathbb{R})$. On se donne des conditions initiales $(a(t_0), \eta(t_0), A(t_0), B(t_0), S(t_0))$ telles que $(A(t_0), B(t_0)) \in \mathcal{V}$ et on considère $(a(t), \eta(t), A(t), B(t), S(t))$ la solution de (3.27) associée à ces conditions initiales. Alors, pour tout multi-indice $l \in \mathbb{N}^d$,*

$$\psi_{\hbar, l}(t, \cdot) = e^{\frac{i}{\hbar} S(t)} \varphi_l(A(t), B(t), \hbar, a(t), \eta(t), \cdot)$$

(où le choix de la racine carrée complexe dans (3.8) ou (3.9) est fait de manière continue en t) vérifie l'équation de Schrödinger (3.26) avec l'hamiltonien (3.25).

Preuve cf. Annexe A.4. □

Corollaire 3.17 *Il existe un unique propagateur unitaire $U(t, s) : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n; \mathbb{C}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n; \mathbb{C})$ associé à l'équation de Schrödinger (3.26) avec l'hamiltonien dépendant du temps (3.25) tel que pour toute solution $(a(t), \eta(t), A(t), B(t), S(t))$ du système (3.27) (dont les conditions initiales vérifient $(A(t_0), B(t_0)) \in \mathcal{V}$) et pour tout multi-indice $l \in \mathbb{N}^d$,*

$$U(t, s)e^{\frac{i}{\hbar}S(s)}\varphi_l(A(s), B(s), \hbar, a(s), \eta(s), \cdot) = e^{\frac{i}{\hbar}S(t)}\varphi_l(A(t), B(t), \hbar, a(t), \eta(t), \cdot).$$

Remarque 3.14 $U(t, s)$ se prolonge par continuité à $L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$.

Corollaire 3.18 *Soit*

$$H_\hbar = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta_x + V(x)$$

un opérateur de Schrödinger où le potentiel $V(x)$ est quadratique en x .

Soit $(a(t), \eta(t), A(t), B(t), S(t))$ la solution du système

$$\begin{cases} \dot{a}(t) &= \eta(t) \\ \dot{\eta}(t) &= -\nabla_x V(a(t)) \\ \dot{A}(t) &= iB(t) \\ \dot{B}(t) &= i\text{Hess}_x V(a(t))A(t) \\ \dot{S}(t) &= \frac{1}{2}\|\eta(t)\|^2 - V(a(t)) \end{cases} \quad (3.28)$$

de condition initiale $(a(t_0), \eta(t_0), A(t_0), B(t_0), S(t_0))$ telle que $(A(t_0), B(t_0)) \in \mathcal{V}$. Alors, pour tout multi-indice $l \in \mathbb{N}^d$,

$$\psi_{\hbar, l}(t, \cdot) = e^{\frac{i}{\hbar}S(t)}\varphi_l(A(t), B(t), \hbar, a(t), \eta(t), \cdot)$$

vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H_\hbar\psi. \quad (3.29)$$

Remarques 3.15

1. (a, η) représente la trajectoire classique dans l'espace des phases, quant à (A, B) , il ne dépend que du flot classique linéarisé car de manière plus explicite on a

$$\begin{aligned} A(t) &= \frac{\partial a(t)}{\partial a(t_0)}A(t_0) + i\frac{\partial a(t)}{\partial \eta(t_0)}B(t_0) \\ B(t) &= -i\frac{\partial \eta(t)}{\partial a(t_0)}A(t_0) + \frac{\partial \eta(t)}{\partial \eta(t_0)}B(t_0) \end{aligned}$$

et S est l'intégrale d'action. Ainsi on voit que, dans la situation quadratique, la connaissance des quantités classiques et un étalement bien choisi par des gaussiennes permet de résoudre exactement le problème quantique associé.

2. H_\hbar est toujours considéré comme opérateur sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$.

3.4 Solutions approchées de l'équation de Schrödinger

Donnons maintenant, sans rappel de preuve, un résultat énoncé dans [Hagedorn98] qui donne le premier ingrédient de l'approximation de Born-Oppenheimer : l'ajustement lent du mouvement des noyaux gouverné par le potentiel associé à un niveau d'énergie électronique (il s'agit en quelque sorte de "Born-Oppenheimer à un niveau").

Théorème 3.19 Soit $V \in \mathcal{C}^3(\mathbb{R}^d; \mathbb{R})$ tel qu'il existe des constantes C_1, C_2 et M avec $-C_1 \leq V(x) \leq C_2 e^{Mx^2}$.

On définit formellement $H_{\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta_x + V(x)$. Soit $(a(t), \eta(t), A(t), B(t), S(t))$ la solution du système (3.28) de condition initiale $(a(t_0), \eta(t_0), A(t_0), B(t_0), S(t_0))$ telle que $(A(t_0), B(t_0)) \in \mathcal{V}$. On se donne c_l pour tout multi-indice $l \in \mathbb{N}^d$ tel que $|l| \leq L$ avec $\sum_{|l| \leq L} |c_l|^2 = 1$. Alors, pour tout $\beta > 0$, il existe une constante $C_L(\beta) > 0$ telle que

$$\sup_{t \in [t_0 - \beta, t_0 + \beta]} \|\psi(t, x, \hbar) - \psi_0(t, x, \hbar)\|_{L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})} \leq C_L(\beta) \hbar^{1/2}$$

où

$$\psi_0(t, x, \hbar) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(t)\right) \sum_{|l| \leq L} c_l \varphi_l(A(t), B(t), \hbar, a(t), \eta(t), x)$$

et où $\psi(t, x, \hbar)$ est la solution de l'équation de Schrödinger (3.29) de condition initiale

$$\psi(t_0, x, \hbar) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(t_0)\right) \sum_{|l| \leq L} c_l \varphi_l(A(t_0), B(t_0), \hbar, a(t_0), \eta(t_0), x). \quad (3.30)$$

Remarques 3.16

1. Le fait que le potentiel soit supposé uniformément borné inférieurement assure que H_{\hbar} est essentiellement autoadjoint sur $\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$ (cf. Théorème X.28 de [ReedSimonII75] et certains commentaires de la Section 2.3).
2. On peut se passer de l'hypothèse sur la croissance à l'infini du potentiel en introduisant des fonctions de troncature autour de la trajectoire classique.
3. Le résultat découle du Lemme 1.3.
4. Avec plus de régularité sur le potentiel (V de classe \mathcal{C}^{N+2}), il existe une version améliorée de ce théorème où l'erreur est d'ordre $\hbar^{N/2}$ (cf. [Hagedorn98]), dans ce cas, on est obligé de faire varier les c_l au cours du temps et le système d'équation qui régit leur évolution fait intervenir les quantités $M_{l,m,j}(A)$ de la Section 3.2.7, de plus même si les conditions initiales ne font intervenir que les paquets d'onde avec $|l| \leq L$, au cours de l'évolution des paquets d'onde avec $|l| \leq L + 3N - 3$ apparaissent. Enfin, avec l'analyticité du potentiel, on obtient même des résultats exponentiellement précis avec superposition éventuelle des paquets d'onde pourvu que la fonction d'onde finale reste suffisamment localisée autour de la trajectoire classique (cf. [HagJoye00]).
5. On renvoie à [CombRobert97] pour une autre formulation du même genre de résultat à l'aide de la représentation métaplectique.

Chapitre 4

Approximation de Born-Oppenheimer dépendante du temps avec presque croisement

Introduction

L'hamiltonien associé à un système moléculaire composé de K noyaux et $N - K$ électrons possède la forme suivante

$$H(\varepsilon) = - \sum_{j=1}^K \frac{\varepsilon^4}{2M_j} \Delta_{x_j} - \sum_{j=K+1}^N \frac{1}{2m_j} \Delta_{x_j} + \sum_{i < j} V_{ij}(x_i - x_j)$$

où $x_j \in \mathbb{R}^d$ désigne la position de la j^e particule, $\varepsilon^{-4}M_j$ (pour $1 \leq j \leq K$) est la masse du j^e noyau, m_j (pour $K + 1 \leq j \leq N$) est la masse du $(j - K)^e$ électron et V_{ij} est un potentiel d'interaction entre les i^e et j^e particules. Le rôle du paramètre ε est de rendre les masses réduites M_j des noyaux d'un ordre de grandeur comparable avec les masses réelles m_j des électrons : pour des molécules réelles, ε est petit car les protons et les neutrons qui composent les noyaux atomiques sont 1835 fois plus lourds que les électrons. On peut d'ailleurs consulter la Section 1.2.1 [Teufel03] pour une discussion plus précise en notant toutefois que le paramètre ε qui y est introduit est le carré de celui introduit ici.

Dans la suite, on supposera que $M_j = 1$ pour $1 \leq j \leq K$ (ce qui est toujours possible quitte à changer les variables de position x_j en $\sqrt{M_j}x_j$), on pose $d = Kl$ et on note $x = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$ le vecteur de configuration nucléaire. Ainsi $H(\varepsilon)$ se décompose en

$$H(\varepsilon) = -\frac{\varepsilon^4}{2} \Delta_x + h(x). \quad (4.1)$$

où $h(x)$ désigne l'hamiltonien électronique qui dépend paramétriquement de x et dont la description exacte importe peu pour ce qui va suivre. Dorénavant, on supposera seulement que

- (H1) $h(x)$ est autoadjoint de domaine fixé \mathcal{D} (indépendant de x) dans un espace de Hilbert séparable \mathcal{H} ,
- (H2) la résolvante de $h(x)$ est fortement \mathcal{C}^3 en $x \in \Omega$ où Ω est un ouvert connexe de \mathbb{R}^d ,
- (H3) il existe une constante $C \in \mathbb{R}$ telle que

$$\forall x \in \Omega, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}, \quad \langle \psi, h(x)\psi \rangle \geq -C\|\psi\|.$$

Comme évoqué dans la Section 2.2, avec $\hbar = \varepsilon^2$, l'opérateur (4.1) est d'abord considéré sur le domaine

$$D = \mathcal{C}_c^2(\Omega; \mathcal{H}) \cap L^2(\Omega; \mathcal{D}) \quad (4.2)$$

puis étendu en un opérateur autoadjoint encore noté $H(\varepsilon)$. On cherche alors à étudier l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} \psi = H(\varepsilon) \psi \quad (4.3)$$

pour t dans un intervalle de temps compact et où $\psi(t) \in L^2(\Omega; \mathcal{H})$. Le facteur ε^2 dans le membre de gauche correspond à un choix particulier de l'échelle de temps qui fait que tous les termes de l'équation jouent un rôle significatif à l'ordre dominant (cf. [Cole68]).

L'idée de base formulée dans [BornOppen27], qui aboutit à l'approximation de Born-Oppenheimer, repose sur le principe suivant : les électrons très légers sont considérés de manière quantique et ajustent instantanément leur état quantique après toute modification de la configuration nucléaire, dans le même temps, les noyaux plus lourds et plus lents sont considérés de manière semiclassique et subissent un potentiel effectif correspondant au niveau d'énergie électronique. La validité de l'approximation dépend alors de manière essentielle du fait que les électrons restent dans un état quantique bien déterminé.

Dans ce contexte, l'opérateur (4.1) et l'équation (4.3) ont fait l'objet de nombreuses études mathématiques dans diverses situations : recherche de solution approchée à divers ordre en ε , étude des résonances, ... On pourra consulter l'introduction de [Hagedorn94] et les Sections 1.2.1, 2.3 et 4.2 de [Teufel03] qui donnent un peu l'état de l'art sur le sujet à diverses périodes. L'objectif de ce chapitre est d'étendre les résultats obtenus dans [HagJoye98] sur la propagation de paquets d'onde gaussiens à travers des presque croisements de type particulier. En ce qui concerne les croisements, on citera les résultats obtenus dans [Colin02] et [Colin03] par des méthodes géométriques de forme normale et ceux de [Fermanian02] et [FermLasser03] pour des mesures de Wigner. Enfin, pour les presque croisements, on mentionne les travaux récents effectués dans [Colin04].

Après avoir rappelé l'approximation de Born-Oppenheimer de [Hagedorn86] pour un état électronique isolé dans la Section 4.1, on décrit avec précision en Section 4.2 le type de presque croisement que l'on va être capable de traiter. Puis, après avoir fait le lien avec les résultats du Chapitre 1 et introduit un certain nombre de définitions et notations, on énonce enfin le théorème principal de ce chapitre en Section 4.6, le reste du chapitre et l'Annexe B étant consacrés à la preuve de ce résultat.

4.1 Approximation de Born-Oppenheimer

4.1.1 Principe de l'approximation : séparation des variables et échelles spatiales multiples

On suppose ici qu'en plus de (H1)-(H3), on a

(HS) $h(x)$ admet une valeur propre simple $E(x)$ de classe \mathcal{C}^3 en $x \in \Omega$ et située à une distance uniformément minorée du reste du spectre de $h(x)$.

On cherche alors une solution de (4.3) qui reste essentiellement dans l'état propre associé à $E(x)$.

Pour cela, on introduit les quantités classiques déjà évoquées dans le Corollaire 3.18

et qui satisfont le système différentiel suivant

$$\begin{cases} \dot{a}(t) &= \eta(t) \\ \dot{\eta}(t) &= -\nabla_x E(a(t)) \\ \dot{A}(t) &= iB(t) \\ \dot{B}(t) &= i\text{Hess}_x E(a(t))A(t) \\ \dot{S}(t) &= \frac{1}{2}\|\eta(t)\|^2 - E(a(t)) \end{cases} \quad (4.4)$$

avec les conditions initiales (à translation près, on suppose que $0 \in \Omega$)

$$\begin{cases} a(0) &= 0 \\ \eta(0) &= \eta^0 \\ A(0) &= A_0 \\ B(0) &= B_0 \\ S(0) &= 0 \end{cases} \quad (4.5)$$

où a, η et S sont à valeurs réelles et A et B à valeurs matricielles complexes, et où bien sûr $(A_0, B_0) \in \mathcal{V}$.

On introduit maintenant une nouvelle variable spatiale $y = \frac{x-a(t)}{\varepsilon}$ (et $\frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{\eta(t)}{\varepsilon}$) et on cherche une solution de (4.3) de la forme

$$\psi(t, x, \varepsilon) = \varphi(t, y, \varepsilon)\Phi(t, x, \varepsilon)$$

où $\varphi(t, y, \varepsilon) \in \mathbb{C}$ et $\Phi(t, x, \varepsilon) \in \mathcal{H}$.

En terme des variables t, x, y (qu'on considérera momentanément indépendantes), on est ramené à résoudre

$$i\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H(t, \varepsilon) \Psi \quad (4.6)$$

où

$$H(t, \varepsilon) = -\frac{\varepsilon^4}{2}\Delta_x - \varepsilon^3 \nabla_y \cdot \nabla_x - \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta_y + i\varepsilon \eta(t) \cdot \nabla_y + E(a(t) + \varepsilon y) + h_E(x)$$

avec $h_E(x) = h(x) - E(x)$. On vérifie alors que si $\Psi(t, x, y, \varepsilon)$ est solution de (4.6) alors $\psi(t, x, \varepsilon) = \Psi\left(t, x, \frac{x-a(t)}{\varepsilon}, \varepsilon\right)$ est solution de (4.3).

En injectant $\Psi(t, x, y, \varepsilon) = \varphi(t, y, \varepsilon)\Phi(t, x, \varepsilon)$ dans (4.6), on a après regroupement de certains termes

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 i \frac{\partial \varphi}{\partial t} \Phi + \varphi i \varepsilon^2 \frac{\partial \Phi}{\partial t} &= -\varepsilon^3 \nabla_y \varphi \cdot \nabla_x \Phi \\ &+ \varepsilon^2 \left[-\frac{1}{2}\Delta_y + \frac{i}{\varepsilon} \eta(t) \cdot \nabla_y + \frac{1}{\varepsilon^2} E(a(t) + \varepsilon y) \right] \varphi \Phi + \varphi \left[-\frac{\varepsilon^4}{2}\Delta_x + h_E(x) \right] \Phi. \end{aligned}$$

On va donc d'abord chercher à résoudre

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left[-\frac{1}{2}\Delta_y + \frac{i}{\varepsilon} \eta(t) \cdot \nabla_y + \frac{1}{\varepsilon^2} E(a(t) + \varepsilon y) \right] \varphi \quad (4.7)$$

et

$$i \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} \Phi = \left[-\frac{\varepsilon^4}{2}\Delta_x + h_E(x) \right] \Phi. \quad (4.8)$$

4.1.2 Traitement de l'équation nucléaire (4.7)

Pour simplifier les écritures, on va tout d'abord poser

$$\begin{aligned} E^{[2]}(u, h) &= E(u) + (\nabla_x E(u), h) + \frac{1}{2}(h, \text{Hess}_x E(u)h) \\ E^{[3]}(u, h) &= E(u+h) - E^{[2]}(u, h). \end{aligned}$$

On sait résoudre exactement (cf. Théorème 3.16)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left[-\frac{1}{2} \Delta_y + \frac{i}{\varepsilon} \eta(t) \cdot \nabla_y + \frac{1}{\varepsilon^2} E^{[2]}(a(t), \varepsilon y) \right] \varphi$$

à l'aide des paquets d'onde du Chapitre 3. On travaille avec l'hamiltonien quadratique

$$H \left[I, 0, \text{Hess}_x E(a(t)), -\frac{1}{\varepsilon} \eta(t), \frac{1}{\varepsilon} \nabla_x E(a(t)), \frac{1}{\varepsilon^2} E(a(t)) \right] (y, p_{1,y}, t)$$

et on est donc amené à considérer le système différentiel ordinaire suivant

$$\begin{cases} \dot{\hat{a}}(t) &= \hat{\eta}(t) - \frac{1}{\varepsilon} \eta(t) \\ \dot{\hat{\eta}}(t) &= -\text{Hess}_x E(a(t)) \hat{a}(t) - \frac{1}{\varepsilon} \nabla_x E(a(t)) \\ \dot{\hat{A}}(t) &= i \hat{B}(t) \\ \dot{\hat{B}}(t) &= i \text{Hess}_x E(a(t)) \hat{A}(t) \\ \dot{\hat{S}}(t) &= \frac{1}{2} \|\hat{\eta}(t)\|^2 - \frac{1}{\varepsilon^2} E^{[2]}(a(t), \varepsilon \hat{a}(t)) \end{cases}$$

et on voit facilement que si on se donne les conditions initiales

$$\begin{cases} \hat{a}(0) &= \mathbf{0} \\ \hat{\eta}(0) &= \frac{1}{\varepsilon} \eta^0 \\ \hat{A}(0) &= \varepsilon A_0 \\ \hat{B}(0) &= \varepsilon B_0 \\ \hat{S}(0) &= 0 \end{cases}$$

on a

$$\begin{cases} \hat{a}(t) &= \mathbf{0} \\ \hat{\eta}(t) &= \frac{1}{\varepsilon} \eta(t) \\ \hat{A}(t) &= \varepsilon A(t) \\ \hat{B}(t) &= \varepsilon B(t) \\ \hat{S}(t) &= \frac{1}{\varepsilon^2} S(t). \end{cases}$$

Finalement on peut donc proposer une solution approchée pour (4.7) à savoir

$$\varphi(t, y, \varepsilon) = \exp\left(\frac{i}{\varepsilon^2} S(t)\right) \varphi_l(\varepsilon A(t), \varepsilon B(t), 1, \mathbf{0}, \frac{1}{\varepsilon} \eta(t), y) \quad (4.9)$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\varepsilon^2} S(t)\right) \varphi_l(A(t), B(t), \varepsilon^2, a(t), \eta(t), a(t) + \varepsilon y) \quad (4.10)$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\varepsilon^2} S(t) + \frac{i}{\varepsilon} \eta(t) \cdot y\right) \varepsilon^{-d/2} \psi_l(A(t), B(t), y). \quad (4.11)$$

4.1.3 Traitement de l'équation électronique (4.8)

Pour résoudre (4.8) à l'ordre dominant, il faut avoir

$$0 = h_E(x)\Phi(t, x, \varepsilon).$$

Par des théorèmes perturbatifs globaux sur les fibrés vectoriels (cf. [Husemoller66]), on sait que, si Ω est contractile, on peut construire un vecteur propre unitaire global \mathcal{C}^3 $\Phi_E(x)$ associée à la valeur propre $E(x)$.

À cause de la connexion de Berry (cf. Section 3.4.2 de [Teufel03]), on va maintenant faire tourner ce vecteur propre en choisissant une phase dépendante du temps pour obtenir un nouveau vecteur propre $\Phi_E(t, x) = e^{i\omega_E(t, x)}\Phi_E(x)$ qui satisfait la condition d'orthogonalité suivante (condition de *transport parallèle*)

$$\langle \Phi_E(t, x), \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta(t) \cdot \nabla_x \right) \Phi_E(t, x) \rangle = 0.$$

Avec le changement de variable $s = t$, $w = x - a(t)$, on voit qu'il suffit d'avoir

$$\frac{\partial}{\partial s} \tilde{\omega}_E(s, w) = i \langle \Phi_E(a(s) + w), \eta(s) \cdot \nabla_x \Phi_E(a(s) + w) \rangle$$

où on a posé $\tilde{\omega}_E(s, w) = \omega_E(s, a(s) + w)$ et où le second membre est bien réel (car $\|\Phi_E(x)\|^2 = 1$ indépendamment de x et en particulier, en dérivant par rapport à x , $\Re \langle \Phi_E(x), \eta(t) \cdot \nabla_x \Phi_E(x) \rangle = 0$).

On fait alors dans un premier temps le choix de prendre

$$\Phi(t, x, \varepsilon) = \Phi_E(t, x). \quad (4.12)$$

4.1.4 Forme complète de l'approximation à l'ordre dominant et extension aux ordres suivants

Finalement avec

$$\Psi(t, x, y, \varepsilon) = \varphi(t, y, \varepsilon)\Phi(t, x, \varepsilon), \quad (4.13)$$

où φ et Φ sont données par (4.10) et (4.12), on résout l'équation (4.6) avec une erreur

$$\begin{aligned} \Xi(t, x, y, \varepsilon) &= \left[i\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} - H(t, \varepsilon) \right] \Psi(t, x, y, \varepsilon) \\ &= i\varepsilon^2 \varphi(t, y, \varepsilon) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta(t) \cdot \nabla_x \right) \Phi_E(t, x) \\ &\quad - E^{[3]}(a(t), \varepsilon y) \varphi(t, y, \varepsilon) \Phi_E(t, x) \\ &\quad + \frac{\varepsilon^4}{2} \varphi(t, y, \varepsilon) \Delta_x \Phi_E(t, x) \\ &\quad + \varepsilon^3 \exp \left(\frac{i}{\varepsilon^2} S(t) + \frac{i}{\varepsilon} \eta(t) \cdot y \right) \varepsilon^{-d/2} \nabla_y \psi_l(A(t), B(t), y) \cdot \nabla_x \Phi_E(x). \end{aligned}$$

En anticipant les estimations faites plus loin, ceci conduit, via le Lemme 1.3, à une erreur qui ne tend pas vers 0 avec ε essentiellement à cause du premier terme. Toutefois, avec le choix de phase de la section précédente, ce terme est orthogonal à la direction qui nous intéresse ce qui va nous être utile pour pousser plus loin la résolution de l'équation. Malheureusement aux ordres suivants, compte tenu du terme mélangeant en $\varepsilon^3 \nabla_y \cdot \nabla_x$, les problèmes ne se découpent pas aussi bien qu'à l'ordre dominant. On va maintenant

chercher $\Psi(t, x, y, \varepsilon)$ sous la forme d'un Ansatz où on a factorisé la phase oscillante entrevue dans $\varphi(t, y, \varepsilon)$ *i.e.* du type

$$\begin{aligned} \Psi(t, x, y, \varepsilon) = & \tag{4.14} \\ & \exp\left(\frac{i}{\varepsilon^2}S(t) + \frac{i}{\varepsilon}\eta(t).y\right) \varepsilon^{-d/2} [\Psi_0(t, x, y) + \varepsilon\Psi_1(t, x, y) + \varepsilon^2\Psi_2(t, x, y) + \dots]. \end{aligned}$$

De plus, compte tenu de la forme déjà trouvée pour $\Psi_0(t, x, y)$

$$\psi_l(A(t), B(t), y)\Phi_E(t, x),$$

on décomposera $\Psi_k(t, x, y)$ ainsi

$$\Psi_k(t, x, y) = g_k(t, y)\Phi_E(t, x) + \Psi_k^\perp(t, x, y)$$

où $g_k(t, y)$ est L^2 en y et $\Psi_k^\perp(t, x, y)$ est orthogonal à $\Phi_E(t, x)$ (on notera qu'on a fait le choix de ne pas faire dépendre g_k de x , car une telle dépendance peut être formellement développée par $x = a(t) + \varepsilon y$ et donc envoyée aux ordres suivants en ε). L'injection formelle de (4.14) dans (4.6) conduit aux premiers ordres en ε à

– Ordre 0

$$0 = h_E(x)\Psi_0^\perp(t, x, y)$$

– Ordre 1

$$0 = h_E(x)\Psi_1^\perp(t, x, y)$$

– Ordre 2

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}g_0 &= \left[-\frac{1}{2}\Delta_y + \text{Hess}_x E(a(t))\frac{y^2}{2}\right]g_0 \\ ig_0(t, y)\left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta(t).\nabla_x\right)\Phi_E(t, x) &= h_E(x)\Psi_2^\perp(t, x, y). \end{aligned}$$

En s'arrêtant au second ordre et en tenant compte uniquement des termes bien déterminés, on a alors (4.13) avec cette fois

$$\Phi(t, x, \varepsilon) = \Phi_E(t, x) + i\varepsilon^2 r_E(x)\left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta(t).\nabla_x\right)\Phi_E(t, x) \tag{4.15}$$

(où $r_E(x)$ désigne la résolvante de $h(x)$ restreinte au sous-espace orthogonal à $\Phi_E(x)$ prise en $E(x)$).

On notera qu'on peut bien sûr poursuivre cette procédure si on dispose de plus de régularité sur la famille ($h(x)$) et on pourra consulter [Hagedorn86] ou [HagJoye01] pour plus de détails.

4.1.5 Estimation de l'erreur à l'ordre 2 et mise en évidence de l'effet exponentiellement petit de la troncature autour de la trajectoire classique

Ainsi avec $\Psi(t, x, y, \varepsilon)$ donnée par (4.13), (4.10) et (4.15), on résout l'équation (4.6) avec une erreur $\Xi(t, x, y, \varepsilon) = [i\varepsilon^2\frac{\partial}{\partial t} - H(t, \varepsilon)]\Psi(t, x, y, \varepsilon)$ qui vérifie

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2}S(t) - \frac{i}{\varepsilon}\eta(t).y\right) \varepsilon^{d/2}\Xi(t, x, y, \varepsilon) = & \\ -E^{[3]}(a(t), \varepsilon y)\tilde{\varphi}(t, y)\Phi(t, x, \varepsilon) + \frac{\varepsilon^4}{2}\tilde{\varphi}(t, y)\Delta_x\Phi(t, x, \varepsilon) & \\ +i\varepsilon^4\tilde{\varphi}(t, y)\left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta(t).\nabla_x\right)[r_E(x)\left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta(t).\nabla_x\right)\Phi_E(t, x)] & \\ +\varepsilon^3\nabla_y\tilde{\varphi}(t, y).\nabla_x\Phi(t, x, \varepsilon) & \end{aligned}$$

où on a posé $\tilde{\varphi}(t, y) = \psi_l(A(t), B(t), y)$.

Par ailleurs, avec $\psi(t, x, \varepsilon) = \Psi\left(t, x, \frac{x-a(t)}{\varepsilon}, \varepsilon\right)$, on résout l'équation (4.3) avec l'erreur

$$\xi(t, x, \varepsilon) = \left[i\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} - H(\varepsilon) \right] \psi(t, x, \varepsilon) = \Xi\left(t, x, \frac{x-a(t)}{\varepsilon}, \varepsilon\right).$$

Pour évaluer rigoureusement l'erreur commise, on va tronquer la solution approchée ainsi construite autour de la trajectoire classique $a(t)$ afin de ne pas avoir à contrôler les dérivées spatiales et temporelles de $\Phi_E(t, x)$ loin de cette trajectoire.

On considère donc une fonction de troncature $F \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}; [0, 1])$ telle que $F(x) = 1$ si $x \leq 1$ et $F(x) = 0$ si $x \geq 2$.

On va alors estimer l'erreur commise dans l'équation (4.6) si on prend la solution approchée

$$\hat{\Psi}(t, x, y, \varepsilon) = F(\gamma\|y\|)\Psi(t, x, y, \varepsilon) \quad (4.16)$$

(où γ tend vers 0 suffisamment lentement : l'erreur sera d'autant plus petite qu'on fera tendre γ plus lentement vers 0)

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2}S(t) - \frac{i}{\varepsilon}\eta(t).y\right) \varepsilon^{d/2} \hat{\Xi}(t, x, y, \varepsilon) = \\ \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2}S(t) - \frac{i}{\varepsilon}\eta(t).y\right) \varepsilon^{d/2} F(\gamma\|y\|)\Xi(t, x, y, \varepsilon) \\ + \varepsilon^3 \gamma \tilde{\varphi}(t, y) F'(\gamma\|y\|) \frac{y}{\|y\|} \cdot \nabla_x \Phi(t, x, \varepsilon) \\ + \varepsilon^2 \gamma \frac{y}{\|y\|} \cdot \nabla_y \tilde{\varphi}(t, y) F'(\gamma\|y\|) \Phi(t, x, \varepsilon) \\ + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \gamma^2 \tilde{\varphi}(t, y) F''(\gamma\|y\|) \Phi(t, x, \varepsilon) \\ + \frac{d-1}{2} \varepsilon^2 \gamma (x-a(t)) \frac{1}{\|y\|^2} \tilde{\varphi}(t, y) F'(\gamma\|y\|) \Phi(t, x, \varepsilon) \\ - i\varepsilon \gamma \eta(t) \cdot \frac{y}{\|y\|} \tilde{\varphi}(t, y) F'(\gamma\|y\|) \Phi(t, x, \varepsilon). \end{aligned}$$

Voyons d'abord que les termes faisant intervenir les dérivées première et seconde de F auront une contribution exponentiellement petite en ε et seront donc négligeables vis-à-vis des autres termes d'erreur : ils se majorent par

$$\varepsilon \gamma \left(\varepsilon^2 + \frac{d-1}{2} \varepsilon + 1 \right) \|F' \tilde{\varphi}\| + \varepsilon^2 \gamma \|F' \nabla_y \tilde{\varphi}\| + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \gamma^2 \|F'' \tilde{\varphi}\|$$

qui sont exponentiellement petits d'après (3.22) et (3.23).

Montrons maintenant que les autres termes d'erreur ont une contribution d'ordre ε^3 : les termes sont tous à considérer en norme L^2 en x où y est considéré comme fonction de x mais comme ils font tous intervenir un produit d'une fonction de y par une fonction de x , on peut majorer la norme recherchée par le produit des normes (respectivement L^2 et L^∞) des fonctions (respectivement de y et de x), ainsi

$$\begin{aligned} & \left\| \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2}S(t) - \frac{i}{\varepsilon}\eta(t).y\right) \varepsilon^{d/2} F(\gamma\|y\|)\Xi(t, x, y, \varepsilon) \right\|_2 \\ & \leq \varepsilon^3 \left\| \|y\|^3 \tilde{\varphi} \right\|_2 \left\| F \frac{E^{(3)}}{6} \Phi \right\|_\infty + \varepsilon^4 \|\tilde{\varphi}\|_2 \left\| F \frac{\Delta_x \Phi}{2} \right\|_\infty \\ & \quad + \varepsilon^4 \|\tilde{\varphi}\|_2 \left\| F \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta \cdot \nabla_x \right) \left[r_E \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta \cdot \nabla_x \right) \Phi_E \right] \right\|_\infty \\ & \quad + \varepsilon^3 \|\nabla_y \tilde{\varphi}\|_2 \|F \nabla_x \Phi\|_\infty. \end{aligned}$$

D'où finalement

$$\left\| \Xi\left(t, x, \frac{x-a(t)}{\varepsilon}, \varepsilon\right) \right\|_{L^2(\Omega; \mathcal{H})} = O(\varepsilon^3). \quad (4.17)$$

4.1.6 Énoncé du résultat

On a finalement le résultat suivant qui donne une justification mathématique de l'idée de Born-Oppenheimer formulée dans l'introduction et qui est apparu pour la première fois dans [Hagedorn86].

Théorème 4.1 *Soient $h(x)$ un hamiltonien qui vérifie les hypothèses (H1)-(H3) et (HS), (a, η, A, B, S) les quantités classiques définies par (4.4)-(4.5) et $\Phi_E(t, x)$ le vecteur propre dynamique défini dans la Section 4.1.3. Dans la région bornée $-T \leq t \leq T$, si on pose*

$$\psi_0(t, x, \varepsilon) = \exp\left(i \frac{S(t)}{\varepsilon^2}\right) \varphi_l(A(t), B(t), \varepsilon^2, a(t), \eta(t), x) \Phi_E(t, x)$$

et si on note $\psi(t, \cdot, \varepsilon)$ la solution de l'équation de Schrödinger (4.3) de condition initiale $\psi(0, \cdot, \varepsilon) = \psi_0(0, \cdot, \varepsilon)$, alors il existe une constante positive $C_l(T)$ telle que

$$\sup_{t \in [-T, T]} \|\psi(t, x, \varepsilon) - \psi_0(t, x, \varepsilon)\|_{L^2(\Omega; \mathcal{H})} \leq C_l(T) \varepsilon$$

quand ε tend vers 0.

Remarques 4.1

1. Si ε/γ est suffisamment petit, le support de la fonction de troncature qui intervient dans la preuve qui précède est toujours inclus dans Ω , ainsi $\psi_0(t, \cdot, \varepsilon)$ est un $O(1)$ en norme dans $L^2(\Omega; \mathcal{H})$ et on a donc bien le début d'un développement asymptotique pour $\psi(t, x, \varepsilon)$.
2. Avec plus de régularité sur l'hamiltonien électronique (\mathcal{C}^{N+2}), on peut obtenir un résultat avec une erreur d'ordre $O(\varepsilon^N)$ (cf. [Hagedorn86]) voire exponentiellement précis si l'hamiltonien est analytique (cf. [HagJoye01]).

Preuve On applique le Lemme 1.3 avec la solution approchée (4.16) (où $\Psi(t, x, y, \varepsilon)$ est donnée par (4.13), (4.10) et (4.15)) qui appartient évidemment à D et les estimations (4.17). On conclut alors en utilisant que, sur le support de troncature, le terme d'ordre deux est en $O(\varepsilon^2)$ et que le fait de tronquer conduit à une erreur exponentiellement petite en ε compte tenu de la structure des paquets d'onde (cf. Proposition 3.15). \square

4.2 Rappel sur un presque croisement de type I

Comme dans le Chapitre 1, on va maintenant introduire un paramètre supplémentaire δ qui correspondra à la distance minimale (en fait la moitié de cette distance) entre deux valeurs propres de l'hamiltonien électronique bien isolées du reste de son spectre.

On s'intéresse donc à la résolution approchée de l'équation de Schrödinger

$$i\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t} \psi = H(\delta, \varepsilon) \psi \tag{4.18}$$

où $H(\delta, \varepsilon)$ est une extension autoadjointe quelconque (cf. Section 2.2) de l'opérateur $-\frac{\varepsilon^4}{2} \Delta_x + h(x, \delta)$ défini sur $\mathcal{C}_c^2(\Omega; \mathcal{H}) \cap L^2(\Omega; \mathcal{D})$ avec $h(x, \delta)$ une famille d'opérateurs autoadjoints uniformément bornés inférieurement de domaine fixé \mathcal{D} (dans \mathcal{H} un espace de Hilbert séparable) et dont la résolvante est \mathcal{C}^3 au sens fort en $(x, \delta) \in \Omega \times]-2\delta_0, 2\delta_0[$ et où Ω est un ouvert de \mathbb{R}^d .

Définition 4.1 *On suppose que $h(x, \delta)$ possède deux valeurs propres $E_{\mathcal{A}}(x, \delta)$ et $E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$ qui dépendent continûment de (x, δ) et qui sont uniformément isolées du reste du spectre*

de $h(x, \delta)$. De plus, on suppose que $\Gamma := \{x \in \Omega \mid E_{\mathcal{A}}(x, 0) = E_{\mathcal{B}}(x, 0)\}$ est réduite à un point ou est une sous-variété connexe propre non vide de Ω et que, par ailleurs, pour tout $(x, \delta) \in \Omega \times (]-2\delta_0, 0[\cup]0, 2\delta_0[)$ on a $E_{\mathcal{A}}(x, \delta) \neq E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$. On dit alors que $h(x, \delta)$ possède un presque croisement en Γ .

Soit $P(x, \delta)$ le projecteur spectral de $h(x, \delta)$ associé à $E_{\mathcal{A}}(x, \delta)$ et $E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$, on pose $h_{\parallel}(x, \delta) = h(x, \delta)P(x, \delta)$.

Dans le cas d'un presque croisement de type I (cf. [Hagedorn98] pour la classification des presque croisements et [HagJoye98] pour la forme normale utilisée ci-dessous dans le cas de type I), Γ est de codimension 1 et les deux valeurs propres sont simples. Ce type de presque croisement arrive, par exemple, pour des molécules diatomiques à cause de la symétrie rotationnelle (le paramètre transverse à Γ correspond alors à la distance entre les deux atomes). On va désormais supposer que 0 appartient à Γ , que la direction x_1 est normale à Γ en 0 et que, quitte à changer x en $x + \delta u$, on a découpé au premier ordre l'influence de x_1 et de δ . On sait alors qu'il existe une base orthonormale $\{\psi_1(x, \delta), \psi_2(x, \delta)\}$ de $P(x, \delta)\mathcal{H}$ qui est \mathcal{C}^3 sur $\Omega \times]-2\delta_0, 2\delta_0[$ (il est relativement facile d'en construire une \mathcal{C}^3 sur un voisinage de $(x, \delta) = (0, 0)$, en reproduisant le procédé déjà utilisé dans la Section 1.3 : on choisit une base orthonormée $\{\psi_1, \psi_2\}$ de $P(0, 0)\mathcal{H}$, on la propage de manière \mathcal{C}^3 par $P(x, \delta)$, elle reste libre dans un voisinage de $(0, 0)$ et il suffit alors de la réorthonormaliser par le procédé de Schmidt ; pour le faire de manière globale, il faut une fois encore faire appel à des théorèmes sur les fibrés vectoriels) et dans laquelle $h_{\parallel}(x, \delta)$ a la forme suivante

$$\begin{aligned} h_{\parallel}(x, \delta) &= h_0(x, \delta) + E(x, \delta) \\ &= \begin{pmatrix} b(x, \delta) & c(x, \delta) + id(x, \delta) \\ c(x, \delta) - id(x, \delta) & -b(x, \delta) \end{pmatrix} + E(x, \delta) \end{aligned} \quad (4.19)$$

où $E(x, \delta) = \text{Tr}(h_{\parallel}(x, \delta))$, $b(x, \delta)$, $c(x, \delta)$ et $d(x, \delta)$ sont des fonctions \mathcal{C}^3 sur l'ouvert $\Omega \times]-2\delta_0, 2\delta_0[$ qui ont les développements limités suivants

$$\begin{cases} b(x, \delta) &= rx_1 + O(\|x\|^2 + \delta^2) \\ c(x, \delta) &= r\delta + O(\|x\|^2 + \delta^2) \\ d(x, \delta) &= O(\|x\|^2 + \delta^2) \\ E(x, \delta) &= O(1) \end{cases} \quad (4.20)$$

avec $r > 0$. Pour alléger les notations, on posera par ailleurs

$$\rho(x, \delta) = \sqrt{b(x, \delta)^2 + c(x, \delta)^2 + d(x, \delta)^2}.$$

4.3 Réduction heuristique au cas adiabatique et prédiction à la Landau-Zener

Si on considère les noyaux de manière physiquement classique comme des particules purement ponctuelles suivant, au moins localement, la trajectoire $(a(t, \delta), \eta(t, \delta))$ associée à la valeur propre moyenne $E(x, \delta)$, l'hamiltonien $H(\delta, \varepsilon)$ devient

$$H(t, \delta) = \frac{1}{2} \|\eta(t, \delta)\|^2 + h(a(t, \delta), \delta)$$

et on est ramené à résoudre l'équation (1.1) avec cet hamiltonien dépendant du temps qui possède un presque croisement générique de deux de ces valeurs propres

$$\frac{1}{2} \|\eta(t, \delta)\|^2 + E(a(t, \delta), \delta) \pm \rho(a(t, \delta), \delta)$$

au sens de la Section 1.3. Si on applique le Théorème 1.4 dans cette situation, on s'attend donc suivant les cas ($\delta \ll \varepsilon$, $\delta = \varepsilon$ et $\delta \gg \varepsilon$) à une probabilité de transition formellement donnée par la formule de *Landau-Zener*, à savoir dans ce cas,

$$\exp\left(-\frac{\pi r}{\eta_1(0, \delta)} \frac{\delta^2}{\varepsilon^2}\right)$$

et c'est exactement le résultat donné ci-après à l'ordre dominant et au premier ordre dans le Théorème 4.4.

4.4 Asymptotique des quantités classiques

On pose

$$E_C(x, \delta) := E(x, \delta) + \nu^C \rho(x, \delta)$$

où $\nu^A = 1$ et $\nu^B = -1$ et on se donne $\eta^0, \eta^{0c} \in C^0([-\delta_0, \delta_0]; \mathbb{R})$ avec $\eta^0(\delta) = \eta^0 + O(\delta)$ et $\eta^{0c}(\delta) = \eta^0 + O(\delta)$ où $\eta_1^0 > 0$. Enfin on se donne un couple (A_0, B_0) dans \mathcal{V} .

On cherche alors à résoudre les systèmes

$$\begin{cases} \dot{a}(t, \delta) &= \eta(t, \delta) \\ \dot{\eta}(t, \delta) &= -\nabla_x E(a(t, \delta), \delta) \\ \dot{A}(t, \delta) &= iB(t, \delta) \\ \dot{B}(t, \delta) &= i\text{Hess}_x E(a(t, \delta), \delta)A(t, \delta) \\ \dot{S}(t, \delta) &= \frac{1}{2}\|\eta(t, \delta)\|^2 - E(a(t, \delta), \delta), \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\begin{cases} \dot{a}^C(t, \delta) &= \eta^C(t, \delta) \\ \dot{\eta}^C(t, \delta) &= -\nabla_x E_C(a^C(t, \delta), \delta) \\ \dot{A}^C(t, \delta) &= iB^C(t, \delta) \\ \dot{B}^C(t, \delta) &= i\text{Hess}_x E_C(a^C(t, \delta), \delta)A^C(t, \delta) \\ \dot{S}^C(t, \delta) &= \frac{1}{2}\|\eta^C(t, \delta)\|^2 - E_C(a^C(t, \delta), \delta) \end{cases} \quad (4.22)$$

avec les conditions initiales

$$\begin{cases} a(0, \delta) &= 0 \\ \eta(0, \delta) &= \eta^0(\delta) \\ A(0, \delta) &= A_0 \\ B(0, \delta) &= B_0 \\ S(0, \delta) &= 0, \end{cases} \quad (4.23)$$

$$\begin{cases} a^C(0, \delta) &= 0 \\ \eta^C(0, \delta) &= \eta^{0c}(\delta) \\ A^C(0, \delta) &= A_0 \\ B^C(0, \delta) &= B_0 \\ S^C(0, \delta) &= 0. \end{cases} \quad (4.24)$$

L'existence et l'unicité de la solution des systèmes précédents sont classiquement données par le théorème de Cauchy-Lipschitz, de plus avec un peu plus de précision, on dispose des asymptotiques suivantes.

Proposition 4.2 *La solution des systèmes différentiels (4.21) et (4.22) de condition initiale respective (4.23) et (4.24) vérifie les asymptotiques suivantes*

$$a(t, \delta) = \eta^0(\delta)t - \nabla_x E(0, \delta) \frac{t^2}{2} + O(t^3), \quad (4.25)$$

$$\eta(t, \delta) = \eta^0(\delta) - \nabla_x E(0, \delta)t + O(t^2), \quad (4.26)$$

$$a^c(t, \delta) = \eta^{0c}(\delta)t - \nabla_x E(0, \delta) \frac{t^2}{2} + O(|t|^3 + \delta t^2) - \nu^c \frac{r}{2\eta_1^{0c}(\delta)} \quad (4.27)$$

$$\times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \left[t \sqrt{(\eta_1^{0c}(\delta)t)^2 + \delta^2} + \frac{\delta^2}{\eta_1^{0c}(\delta)} \ln \left(\frac{\eta_1^{0c}(\delta)t + \sqrt{(\eta_1^{0c}(\delta)t)^2 + \delta^2}}{\delta} \right) - 2\delta t \right],$$

$$\eta^c(t, \delta) = \eta^{0c}(\delta) - \nabla_x E(0, \delta)t + O(t^2 + \delta|t|) \quad (4.28)$$

$$- \nu^c \frac{r}{\eta_1^{0c}(\delta)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \left[\sqrt{(\eta_1^{0c}(\delta)t)^2 + \delta^2} - \delta \right],$$

$$S(t, \delta) = \left(\frac{1}{2} \|\eta^0(\delta)\|^2 - E(0, \delta) \right) t - \eta^0(\delta) \cdot \nabla_x E(0, \delta) t^2 + O(t^3) \quad (4.29)$$

$$S^c(t, \delta) = \left(\frac{1}{2} \|\eta^{0c}(\delta)\|^2 - E(0, \delta) \right) t - \eta^{0c}(\delta) \cdot \nabla_x E(0, \delta) t^2 + O(t^3 + \delta^2 t) \quad (4.30)$$

$$- \nu^c r \left[t \sqrt{(\eta_1^{0c}(\delta)t)^2 + \delta^2} + \frac{\delta^2}{\eta_1^{0c}(\delta)} \ln \left(\frac{\eta_1^{0c}(\delta)t + \sqrt{(\eta_1^{0c}(\delta)t)^2 + \delta^2}}{\delta} \right) - \delta t \right],$$

$$A^c(t, \delta) = A_0 + O(t), \quad (4.31)$$

$$B^c(t, \delta) = B_0 + \nu^c i r \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} A_0 \int_0^t \frac{r^3 \delta^2}{\rho(a^c(\tau, \delta), \delta)^3} d\tau + O(|t| + \delta)$$

$$= B_0 + \nu^c i r \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} A_0 \frac{t}{\sqrt{(\eta_1^{0c}(\delta)t)^2 + \delta^2}} + O(|t| + \delta) \quad (4.32)$$

quand t et δ tendent vers 0 (où, de plus, (4.25), (4.26) et (4.31) sont uniformes en δ).

Remarque 4.2 À partir de maintenant, on omettra de préciser la dépendance en δ des fonctions (a, η, A, B, S) qui nous intéressent afin d'alléger les écritures.

Preuve cf. Annexe B.1. □

4.5 Choix des vecteurs propres

Comme dans la Section 1.4, on va faire un choix explicite de vecteurs propres afin de pouvoir contrôler leurs dérivées (ici spatiales, temporelles dans le Chapitre 1). Pour les mêmes raisons, on va introduire deux zones correspondant aux deux hémisphères et tout va se dérouler en gros de la même façon excepté la largeur caractéristique des paquets d'onde qui va obliger à introduire des zones de troncature et ainsi introduire une condition purement technique qui empêche de s'approcher arbitrairement proche de l'hypersurface de croisement indépendamment de ε . En effet, la zone de troncature ne

doit pas rencontrer l'hypersurface de croisement sinon une partie du paquet d'ondes va déjà commencer à vouloir transiter alors que la partie centrale de ce paquet est encore loin de la zone de transition.

4.5.1 Mise en situation : hypersurface de croisement *vs* zones de troncature

On choisit $T > 0$ suffisamment petit pour avoir les asymptotiques de la Proposition 4.2 ($T \leq \min(T_0, T_0^C)$ de l'Annexe B.1). On définit pour $\delta \in]-2\delta_0, 2\delta_0[$,

$$Z_-(\delta) = \left\{ x \in \Omega / b(x, \delta) < \frac{1}{2}\rho(x, \delta) \right\}, \quad Z_+(\delta) = \left\{ x \in \Omega / b(x, \delta) > -\frac{1}{2}\rho(x, \delta) \right\}$$

les régions où $h_1(x, \delta)$ évite une forme diagonale spécifique,

$$J(\delta) = \left\{ x \in \Omega / \rho(x, \delta) > \frac{r}{2}\sqrt{x_1^2 + \delta^2} \right\}$$

la région où on sait bien contrôler la taille du "gap",

$$U^C(t, \delta, \varepsilon, \gamma) = \left\{ x \in \Omega / \|x - a^C(t, \delta)\|_\infty \leq \sqrt{2}\frac{\varepsilon}{\gamma} \right\}$$

pour $t \in [-T, T]$ la boule de troncature à l'instant t et finalement

$$W_-^C(t, \delta, \varepsilon, \gamma) = \bigcup_{s \in [-T, t]} U^C(s, \delta, \varepsilon, \gamma), \quad W_+^C(t, \delta, \varepsilon, \gamma) = \bigcup_{s \in [t, T]} U^C(s, \delta, \varepsilon, \gamma)$$

les deux tubes disjoints de troncature entrant et sortant (le premier sera utilisé pour $t < 0$ et le second pour $t > 0$), ces trois derniers étant représentés sur la Figure 4.1.

Par analogie avec la Section 1.4.1, on a alors le résultat suivant qui stipule dans quelle zone on va être capable de contrôler la taille du "gap" et le choix d'un hémisphère.

Proposition 4.3 *Il existe une constante $M > 0$ telle que si le quadruplet $(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$ est dans $[-T, T] \times]0, \delta_0] \times]0, 1] \times]0, 1]$ et vérifie $|t| \geq M\frac{\varepsilon}{\gamma}$, on a, si $t < 0$,*

$$W_-^C(t, \delta, \varepsilon, \gamma) \subseteq (Z_-(\delta) \cap J(\delta)),$$

et si $t > 0$,

$$W_+^C(t, \delta, \varepsilon, \gamma) \subseteq (Z_+(\delta) \cap J(\delta)).$$

De plus, on a

$$a^C([-T, T], \delta) \subseteq J(\delta)$$

et pour tout x dans $U^C(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$,

$$\rho(x, \delta) > \frac{r}{2}\sqrt{\frac{\eta_1^2}{16}t^2 + \delta^2} \geq R(|t| + \delta).$$

Preuve cf. Annexe B.2. □

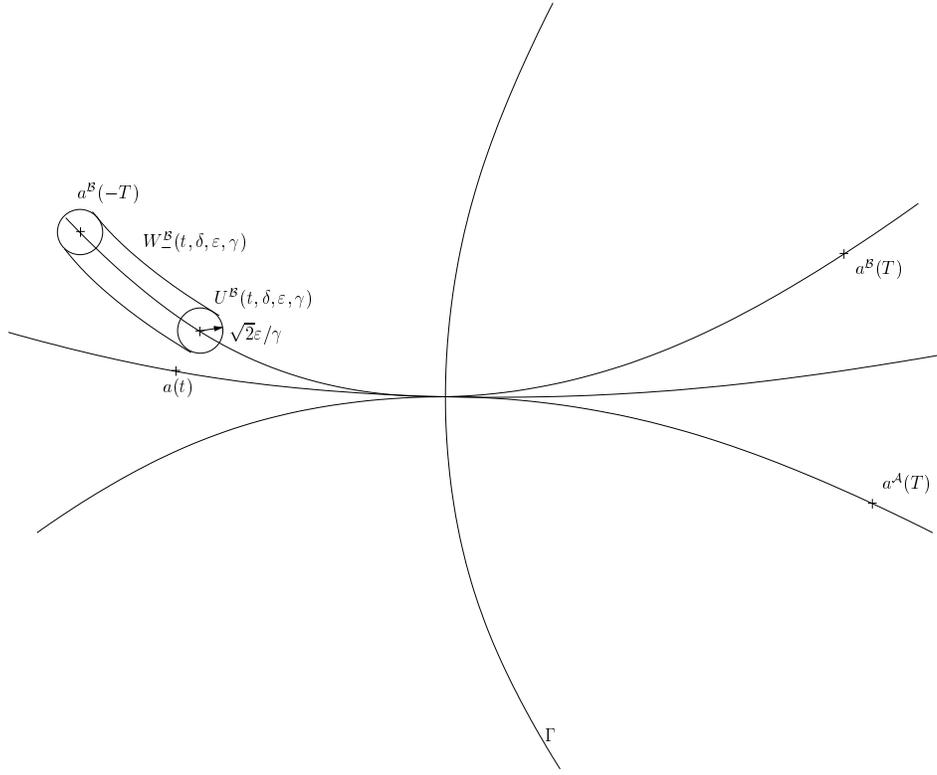


FIG. 4.1 – Mouvement classique des noyaux à travers la surface de croisement.

4.5.2 Construction des vecteurs propres

Pour $(x, \delta) \in \Omega \times]0, 2\delta_0[$, on définit les quantités (en omettant les paramètres (x, δ))

$$B(x, \delta) = \frac{b}{\rho}, \quad C(x, \delta) = \frac{c}{\rho}, \quad D(x, \delta) = \frac{d}{\rho},$$

$$A(x, \delta) = C + iD,$$

$$f^-(x, \delta) = \sqrt{\frac{1-B}{2}}, \quad g^-(x, \delta) = \frac{A}{\sqrt{2(1-B)}}$$

pour $B(x, \delta) < 1$ et

$$f^+(x, \delta) = \sqrt{\frac{1+B}{2}}, \quad g^+(x, \delta) = \frac{A}{\sqrt{2(1+B)}}$$

pour $B(x, \delta) > -1$.

On définit alors des vecteurs propres statiques par

$$\begin{aligned} \Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta) &= g^- \psi_1 + f^- \psi_2 \\ \Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta) &= -f^- \psi_1 + \overline{g^-} \psi_2 \end{aligned}$$

pour $B(x, \delta) < 1$ et

$$\begin{aligned} \Phi_{\mathcal{A}}^+(x, \delta) &= f^+ \psi_1 + \overline{g^+} \psi_2 \\ \Phi_{\mathcal{B}}^+(x, \delta) &= -g^+ \psi_1 + f^+ \psi_2 \end{aligned}$$

pour $B(x, \delta) > -1$.

Comme dans le Chapitre 1 ou la Section 4.1.3, on va faire tourner ces vecteurs propres unitaires de manière dynamique en posant

$$\Phi_{\mathcal{C}}^*(t, x, \delta) = e^{i\omega_{\mathcal{C}}^*(t, x, \delta)} \Phi_{\mathcal{C}}^*(x, \delta)$$

pour $\mathcal{C} = \mathcal{A}, \mathcal{B}$ et $*$ = +, - en vue de satisfaire la condition d'orthogonalité suivante

$$\langle \Phi_{\mathcal{C}}^*(t, x, \delta), \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{C}}(t) \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{C}}^*(t, x, \delta) \rangle = 0.$$

Avec le changement de variable $s = t$, $z = x - a^{\mathcal{C}}(t)$, on voit qu'il suffit d'avoir

$$\frac{\partial}{\partial s} \tilde{\omega}_{\mathcal{C}}^*(s, z, \delta) = i \langle \Phi_{\mathcal{C}}^*(a^{\mathcal{C}}(s) + z, \delta), \eta^{\mathcal{C}}(s) \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^*(a^{\mathcal{C}}(s) + z, \delta) \rangle \quad (4.33)$$

où on a posé $\tilde{\omega}_{\mathcal{C}}^*(s, z, \delta) = \omega_{\mathcal{C}}^*(s, a^{\mathcal{C}}(s) + z, \delta)$. Enfin, on choisit de manière arbitraire les conditions initiales $\omega_{\mathcal{C}}^-(-T, x, \delta) = 0$ et $\omega_{\mathcal{C}}^+(T, x, \delta) = 0$.

4.6 Énoncé du résultat

On énonce ici le principal résultat de ce chapitre sur la propagation de paquets d'onde gaussiens à travers un presque croisement de codimension 1 comme décrit dans la Section 4.2. Tout d'abord, pour abrégier les écritures, on pose, pour $t \in [-T, T]$,

$$\underline{F}\varphi_l^{\mathcal{C}}(t, y, \varepsilon, \gamma) = F(\gamma \|y\|) \exp\left(i \frac{S^{\mathcal{C}}(t)}{\varepsilon^2} + i \frac{\eta^{\mathcal{C}}(t) \cdot y}{\varepsilon}\right) \psi_l(A^{\mathcal{C}}(t), B^{\mathcal{C}}(t), y).$$

Théorème 4.4 *Soit $h(x, \delta)$ un hamiltonien comme dans la Section 4.2 et $\psi(t, x, \delta, \varepsilon)$ la solution de l'équation de Schrödinger associée (4.18) telle que*

$$\psi(-T, x, \delta, \varepsilon) = \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^-(\delta, \varepsilon) \underline{F}\varphi_l^{\mathcal{C}}\left(-T, \frac{x - a^{\mathcal{C}}(-T)}{\varepsilon}, \varepsilon, \gamma\right) \Phi_{\mathcal{C}}^-(-T, x, \delta)$$

où $|\Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon)|^2 + |\Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon)|^2 = 1$, alors on a

$$\left\| \psi(T, x, \delta, \varepsilon) - \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \underline{F}\varphi_l^{\mathcal{C}}\left(T, \frac{x - a^{\mathcal{C}}(T)}{\varepsilon}, \varepsilon, \gamma\right) \Phi_{\mathcal{C}}^+(T, x, \delta) \right\|_{L^2(\Omega; \mathcal{H})} = o(1) \quad (4.34)$$

où

$$\begin{pmatrix} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) \end{pmatrix} = S(\delta, \varepsilon) \begin{pmatrix} \Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon) \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon) \end{pmatrix},$$

avec,

- si $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$,

$$S(\delta, \varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega_{\mathcal{AB}}(\delta, \varepsilon)} \\ e^{i\omega_{\mathcal{BA}}(\delta, \varepsilon)} & 0 \end{pmatrix}$$

- si $\delta = \varepsilon$,

$$S(\delta = \varepsilon, \varepsilon) = \begin{pmatrix} e^{i\omega_{\mathcal{A}}(\varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{4\eta_1^0}} \sqrt{\frac{\pi r}{\eta_1^0}} \frac{1}{\Gamma(1 - \frac{ir}{2\eta_1^0})} & -e^{i\omega_{\mathcal{AB}}(\varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{2\eta_1^0}} \\ e^{i\omega_{\mathcal{BA}}(\varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{2\eta_1^0}} & e^{i\omega_{\mathcal{B}}(\varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{4\eta_1^0}} \sqrt{\frac{\pi r}{\eta_1^0}} \frac{1}{\Gamma(1 + \frac{ir}{2\eta_1^0})} \end{pmatrix}$$

- si $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$,

$$S(\delta, \varepsilon) = \begin{pmatrix} e^{i\omega_{\mathcal{A}}(\delta, \varepsilon)} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_{\mathcal{B}}(\delta, \varepsilon)} \end{pmatrix}$$

où les différentes phases ne dépendent que du choix des phases initiales des vecteurs propres $\Phi_{\mathcal{C}}^*(t, x, \delta)$ et sont telles que la matrice $S(\delta, \varepsilon)$ est unitaire.

De plus, si $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$ et si $\delta/\varepsilon^{7/5} \rightarrow +\infty$, alors, avec

$$S(\delta, \varepsilon) = \begin{pmatrix} \frac{\delta}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\pi r}{\eta_1^0}} e^{i\omega_{\mathcal{A}}(\delta, \varepsilon)} & \sqrt{1 - \frac{\pi r}{\eta_1^0} \frac{\delta^2}{\varepsilon^2}} e^{i\omega_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\delta, \varepsilon)} \\ \sqrt{1 - \frac{\pi r}{\eta_1^0} \frac{\delta^2}{\varepsilon^2}} e^{i\omega_{\mathcal{B}\mathcal{A}}(\delta, \varepsilon)} & \frac{\delta}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\pi r}{\eta_1^0}} e^{i\omega_{\mathcal{B}}(\delta, \varepsilon)} \end{pmatrix},$$

on a (4.34) en remplaçant le terme d'erreur du second membre par $o\left(\frac{\delta}{\varepsilon}\right)$.

Remarques 4.3

1. Le cas $\delta = \varepsilon$ a déjà été traité complètement dans [HagJoye98], ce théorème permet donc de le compléter en l'étendant à d'autres tailles de "gap".
2. Dans [HagJoye99] et toujours avec $\delta = \varepsilon$, d'autres types de presque croisement de codimension plus grande sont traités. Au prix de la technique, le théorème précédent doit pouvoir être étendu à ces derniers. On notera d'ailleurs que dans le cas de codimension 2, compte tenu de la largeur du paquet d'ondes incident, le centre et les bords de celui-ci avaient un comportement différent puisqu'ils subissaient des tailles différentes de "gap" (chose déjà entrevue pour les croisements dans les Figures 1 et 2 et le Théorème 6.3 de [Hagedorn94] et dans la Section 12 de [Colin02] humoristiquement intitulée "the dromadery becomes a Bactrian").
3. La régularité supposée sur $h(x, \delta)$ ne prend pas en compte les singularités de type coulombienne mais [Hagedorn88] et [KleinMartSeilWang92] donnent un aperçu de la technique qu'il faudrait utiliser pour intégrer cette difficulté supplémentaire et ainsi améliorer notre résultat.

Comme dans le Chapitre 1, le reste de ce chapitre va être consacré à la preuve de ce théorème et la stratégie utilisée est en tout point similaire à celle du Théorème 1.4 du Chapitre 1.

4.7 Loin du temps de croisement

Par analogie avec le Théorème 4.1, on a le résultat suivant.

Lemme 4.5 *Dans la région entrante $-T \leq t \leq -t_e(\delta, \varepsilon) < 0$, si on pose*

$$\psi_E(t, x, \delta, \varepsilon) = \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^-(\delta, \varepsilon) F\left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{C}}(t)\|}{\varepsilon}\right) \exp\left(i \frac{S^{\mathcal{C}}(t)}{\varepsilon^2}\right) \varphi_l^{\mathcal{C}}(t, \varepsilon, x) \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) \quad (4.35)$$

où $\Lambda_{\mathcal{C}}^-(\delta, \varepsilon) = O(1)$ et si on note $\psi(t, \cdot, \delta, \varepsilon)$ la solution de l'équation de Schrödinger (4.18) de condition initiale $\psi(-T, \cdot, \delta, \varepsilon) = \psi_E(-T, \cdot, \delta, \varepsilon)$, on a

$$\sup_{t \in [-T, -t_e]} \|\psi(t, x, \delta, \varepsilon) - \psi_E(t, x, \delta, \varepsilon)\|_{L^2(\Omega; \mathcal{H})} = O\left(\varepsilon \ln \frac{1}{t_e + \delta} + \frac{\varepsilon^2}{(t_e + \delta)^2} + \frac{\varepsilon^4}{(t_e + \delta)^3}\right)$$

quand δ et ε tendent vers 0 et où $\gamma(\delta, \varepsilon)$ et $t_e(\delta, \varepsilon)$ tendent vers 0 et sont tels que $\varepsilon/(t_e(\delta, \varepsilon)\gamma(\delta, \varepsilon))$ est borné.

Remarques 4.4

1. On a bien sûr un résultat analogue dans la région sortante $0 < t_e(\delta, \varepsilon) \leq t \leq T$ en remplaçant $\psi_E(t, x, \delta, \varepsilon)$, $\Phi_C^-(t, x, \delta)$ et $\Lambda_C^-(\delta, \varepsilon)$ par $\psi_S(t, x, \delta, \varepsilon)$, $\Phi_C^+(t, x, \delta)$ et $\Lambda_C^+(\delta, \varepsilon)$ respectivement.
2. La présence dans la formulation du résultat de la fonction de troncature n'est pas anodine et ne sert pas uniquement pour l'estimation de l'erreur : elle est indispensable car a priori $\Phi_C^-(t, x, \delta)$ n'est pas bien défini au voisinage de l'hypersurface de croisement Γ .
3. On a vu qu'il faut choisir T relativement petit pour être sûr que $a^C(t)$ n'est proche de Γ que pour t voisin de 0, mais si on peut s'assurer de cette hypothèse autrement, le Théorème 4.1 permet de traiter le contrôle de l'erreur sur l'intervalle de temps entre $-\tilde{T}$ quelconque fini et $-T$ relativement petit qui précède et ainsi traiter un intervalle de temps plus long puisque la traversée de la surface de croisement ne possède une influence que localement.
4. Contrairement au cas adiabatique, à cause du traitement semiclassique des noyaux et de la largeur caractéristique des paquets d'onde, le temps t_e ne peut pas être choisi arbitrairement petit indépendamment de ε . Avec t_e et δ fixés strictement positifs, on retrouve le terme d'erreur du Théorème 4.1.

Preuve cf. Annexe B.3 □

4.8 Au voisinage du temps de croisement

4.8.1 Forme de l'approximation

Lemme 4.6 *Dans la région intérieure $-t_i(\delta, \varepsilon) \leq t \leq t_i(\delta, \varepsilon)$, si on pose*

$$\psi_I(t, x, \delta, \varepsilon) = \exp\left(i \frac{S(t) + \eta(t) \cdot (x - a(t))}{\varepsilon^2}\right) \sum_{k=1,2} f_k\left(\frac{t}{\varepsilon}, \frac{x - a(t)}{\varepsilon}, \delta, \varepsilon\right) \psi_k(x, \delta)$$

avec, pour $\begin{pmatrix} f_1(s, y, \delta, \varepsilon) \\ f_2(s, y, \delta, \varepsilon) \end{pmatrix}$, respectivement

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{pmatrix} g_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir(\eta_1^0 \frac{s^2}{2} + sy_1)} \\ g_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir(\eta_1^0 \frac{s^2}{2} + sy_1)} \end{pmatrix} \text{ si } \delta/\varepsilon \rightarrow 0 \\ \begin{pmatrix} g_1(y, \varepsilon) D_{-\frac{ir}{2\eta_1^0}} + g_2(y, \varepsilon) \frac{1-i}{2} \sqrt{\frac{r}{\eta_1^0}} D_{\frac{ir}{2\eta_1^0}-1} \\ -g_1(y, \varepsilon) \frac{1+i}{2} \sqrt{\frac{r}{\eta_1^0}} D_{-\frac{ir}{2\eta_1^0}-1} + g_2(y, \varepsilon) D_{\frac{ir}{2\eta_1^0}} \end{pmatrix} \left(-(1+i) \sqrt{\frac{r}{\eta_1^0}} (\eta_1^0 s + y_1) \right) \text{ si } \delta = \varepsilon \\ \begin{pmatrix} g_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} - g_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} \\ g_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} + g_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} \end{pmatrix} \text{ si } \delta/\varepsilon \rightarrow +\infty \end{array} \right.$$

(où $g_k(y, \delta, \varepsilon)$ vérifie dans chacun des cas les contraintes qu'on mentionne dans la preuve qui suit) et si on note $\psi(t, \cdot, \delta, \varepsilon)$ la solution de l'équation de Schrödinger (4.18) de condition initiale $\psi(0, \cdot, \delta, \varepsilon) = \psi_I(0, \cdot, \delta, \varepsilon)$, alors on a

$$\sup_{t \in [-t_i, t_i]} \|\psi(t, x, \delta, \varepsilon) - \psi_I(t, x, \delta, \varepsilon)\| = \begin{cases} O\left(t_i + \frac{t_i^3}{\varepsilon^2} + \frac{t_i \delta}{\varepsilon^2} + \frac{t_i^2}{\varepsilon}\right) \text{ si } \delta/\varepsilon \rightarrow 0 \\ O\left(t_i + \frac{t_i^3}{\varepsilon^2} + \frac{t_i^2}{\varepsilon}\right) \text{ si } \delta = \varepsilon \\ O\left(\frac{t_i \delta^2}{\varepsilon^2} + \frac{t_i^2 \delta}{\varepsilon^2} + \frac{t_i}{\delta} + \frac{t_i^2}{\delta \varepsilon} + \frac{t_i^3}{\delta \varepsilon^2}\right) \text{ si } \delta/\varepsilon \rightarrow +\infty \end{cases}$$

dans $L^2(\Omega; \mathcal{H})$ quand δ et ε tendent vers 0.

Remarques 4.5

1. Ici la fonction de troncature n'est pas indispensable à la formulation du résultat puisque les vecteurs $\psi_k(x, \delta)$ sont définis partout. Par contre, elle intervient fortement dans l'estimation de l'erreur puisqu'on ne sait pas contrôler les dérivées spatiales de ces vecteurs.
2. Le cas $\delta = \varepsilon$ qui fait apparaître les fonctions paraboliques cylindriques $D_n(z)$ est bien sûr déjà présent dans [HagJoye98] et la preuve donnée peut d'ailleurs s'adapter aux deux autres cas, toutefois cela ferait intervenir les fonctions spéciales $D_n(z)$ où le paramètre n et la variable z dépendent simultanément de nos deux petits paramètres δ et ε et l'asymptotique de telles fonctions est assez difficile à traiter. C'est pourquoi la technique employée ici pour ces deux cas sera un peu différente et finalement plus basique dans la mesure où tous les termes n'ont alors plus le même poids à l'ordre dominant.
3. La prochaine section est consacrée à la preuve de ce lemme. Bien que relativement technique, nous l'avons gardée dans le corps du texte car elle constitue le coeur de la preuve du Théorème 4.4 puisqu'elle décrit explicitement la traversée de la surface de (presque) croisement.
4. Comme pour le Lemme 1.6, le résultat peut être amélioré jusqu'au premier ordre notamment si $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$, les modifications des fonctions f_k sont d'ailleurs mentionnées dans la Section 4.9.2 par les formules (4.48) et (4.49).

4.8.2 Preuve du domaine de validité du Lemme 4.6

On effectue un changement d'échelle de temps $s = t/\varepsilon$, l'équation (4.18) devient alors

$$i\varepsilon \frac{\partial}{\partial s} \hat{\psi} = H(\delta, \varepsilon) \hat{\psi}$$

où $\hat{\psi}(s, x, \delta, \varepsilon) = \psi(\varepsilon s, x, \delta, \varepsilon)$. On injecte alors dans cette équation la solution approchée

$$\hat{\psi}_I(s, x, \delta, \varepsilon) = F \left(\gamma \frac{\|x - a(\varepsilon s)\|}{\varepsilon} \right) e^{i/\varepsilon^2 [S(\varepsilon s) + \eta(\varepsilon s) \cdot (x - a(\varepsilon s))]} \sum_{k=1,2} f_k \left(s, \frac{x - a(\varepsilon s)}{\varepsilon}, \delta, \varepsilon \right) \psi_k(x, \delta),$$

l'erreur commise est alors, si on omet la contribution des dérivées de la fonction de troncature (qui est exponentiellement petite avec un choix convenable des fonctions g_k et h_k définies plus loin),

$$\exp \left(-i \frac{S(\varepsilon s)}{\varepsilon^2} - i \frac{\eta(\varepsilon s) \cdot y}{\varepsilon} \right) \hat{\Xi}(s, x, y, \delta, \varepsilon) = \sum_{k=1,2} \left(i\varepsilon \frac{\partial f_k}{\partial s}(s, y, \delta, \varepsilon) \psi_k(x, \delta) - f_k(s, y, \delta, \varepsilon) h_0(x, \delta) \psi_k(x, \delta) \right) \quad (4.36)$$

$$- \hat{E}_1(a(\varepsilon s), \delta, \varepsilon y) \sum_{k=1,2} f_k(s, y, \delta, \varepsilon) \psi_k(x, \delta) \quad (4.37)$$

$$+ \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{k=1,2} \Delta_y f_k(s, y, \delta, \varepsilon) \psi_k(x, \delta) \quad (4.38)$$

$$+ i\varepsilon^2 \sum_{k=1,2} f_k(s, y, \delta, \varepsilon) \eta(\varepsilon s) \cdot \nabla_x \psi_k(x, \delta) \quad (4.39)$$

$$+ \varepsilon^3 \sum_{k=1,2} \nabla_y f_k(s, y, \delta, \varepsilon) \cdot \nabla_x \psi_k(x, \delta) \quad (4.40)$$

$$+ \frac{\varepsilon^4}{2} \sum_{k=1,2} f_k(s, y, \delta, \varepsilon) \Delta_x \psi_k(x, \delta) \quad (4.41)$$

où $h_0(x, \delta)$ est défini par (4.19).

Le premier terme (4.36) donne déjà lieu à une erreur consistante, on va donc chercher à le faire disparaître au mieux par un choix judicieux des f_k , *i.e.* résoudre de manière approchée

$$i\varepsilon \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b(a(\varepsilon s) + \varepsilon y, \delta) & (c + id)(a(\varepsilon s) + \varepsilon y, \delta) \\ (c - id)(a(\varepsilon s) + \varepsilon y, \delta) & -b(a(\varepsilon s) + \varepsilon y, \delta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}.$$

La première erreur commise en ne traitant pas les termes restants (4.37)-(4.41) est alors en

$$O(\varepsilon^2(1 + \|y\|^2)|f_k| + \varepsilon^3|\nabla_y f_k| + \varepsilon^2|\Delta_y f_k|). \quad (4.42)$$

Compte tenu de (1.3) et de la Proposition 4.2, on est ramené à l'équation

$$i\varepsilon \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} \eta_1^0 \varepsilon s + \varepsilon y_1 & \delta \\ \delta & -(\eta_1^0 \varepsilon s + \varepsilon y_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}. \quad (4.43)$$

La seconde erreur est alors en

$$O((\varepsilon^2 s^2 + \varepsilon^2 \|y\|^2 + \delta^2)|f_k|). \quad (4.44)$$

On distingue alors trois situations :

1. $\delta/\varepsilon \rightarrow 0$ et on est ramené au système

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} \eta_1^0 s + y_1 & 0 \\ 0 & -(\eta_1^0 s + y_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix},$$

qu'on résout en

$$\begin{aligned} f_1(s, y, \delta, \varepsilon) &= g_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir(\eta_1^0 \frac{s^2}{2} + sy_1)} \\ f_2(s, y, \delta, \varepsilon) &= g_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir(\eta_1^0 \frac{s^2}{2} + sy_1)} \end{aligned}$$

ce qui conduit à une erreur supplémentaire en

$$O(\delta|f_k|) \quad ; \quad (4.45)$$

2. $\delta = \varepsilon$ et on est ramené de manière exacte au système

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} \eta_1^0 s + y_1 & 1 \\ 1 & -(\eta_1^0 s + y_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix},$$

qu'on résout exactement à l'aide des fonctions paraboliques cylindriques de Whittaker $D_n(z)$ (cf. [WhittWatson27])

$$\begin{aligned} f_1(s, y, \delta = \varepsilon, \varepsilon) &= \\ &\left(g_1(y, \varepsilon) D_{-\frac{ir}{2\eta_1^0}} + g_2(y, \varepsilon) \frac{1-i}{2} \sqrt{\frac{r}{\eta_1^0}} D_{\frac{ir}{2\eta_1^0}-1} \right) \left(-(1+i) \sqrt{\frac{r}{\eta_1^0}} (\eta_1^0 s + y_1) \right) \\ f_2(s, y, \delta = \varepsilon, \varepsilon) &= \\ &\left(-g_1(y, \varepsilon) \frac{1+i}{2} \sqrt{\frac{r}{\eta_1^0}} D_{-\frac{ir}{2\eta_1^0}-1} + g_2(y, \varepsilon) D_{\frac{ir}{2\eta_1^0}} \right) \left(-(1+i) \sqrt{\frac{r}{\eta_1^0}} (\eta_1^0 s + y_1) \right) \quad ; \end{aligned}$$

3. $\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$ et on est ramené au système

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\varepsilon} \\ \frac{\delta}{\varepsilon} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix},$$

qu'on résout en

$$\begin{aligned} f_1(s, y, \delta, \varepsilon) &= g_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} - g_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} \\ f_2(s, y, \delta, \varepsilon) &= g_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} + g_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir \frac{\delta}{\varepsilon} s}. \end{aligned}$$

Malheureusement cette réalisation approchée donne lieu à des termes d'erreur en $O\left(\frac{|t|}{\varepsilon} + \frac{t^2}{\varepsilon^2}\right)$ qu'on ne peut espérer recoller avec la solution en dehors du temps de croisement compte tenu de la condition $\varepsilon/(\tau\gamma)$ borné, on va donc raffiner la résolution du système en cherchant f_k sous la forme d'un développement asymptotique en $\frac{\varepsilon}{\delta}$

$$f_k(s, y, \delta, \varepsilon) = f_k^0(s, y, \delta, \varepsilon) + \frac{\varepsilon}{\delta} f_k^1(s, y, \delta, \varepsilon) + \dots$$

qu'on injecte dans (4.43). On va donc résoudre successivement

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1^0 \\ f_2^0 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\varepsilon} \\ \frac{\delta}{\varepsilon} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1^0 \\ f_2^0 \end{pmatrix}$$

et

$$i \frac{\partial}{\partial s} \begin{pmatrix} f_1^1 \\ f_2^1 \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\varepsilon} \\ \frac{\delta}{\varepsilon} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1^1 \\ f_2^1 \end{pmatrix} + r \frac{\delta}{\varepsilon} \begin{pmatrix} \eta_1^0 s + y_1 & 0 \\ 0 & -(\eta_1^0 s + y_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1^0 \\ f_2^0 \end{pmatrix}.$$

Ce qui donne lieu aux solutions approchées

$$\begin{aligned} [f_1^0 + f_2^0](s, y, \delta, \varepsilon) &= g_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} \\ [-f_1^0 + f_2^0](s, y, \delta, \varepsilon) &= g_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [f_1^1 + f_2^1](s, y, \delta, \varepsilon) &= \\ & h_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} - g_2(y, \delta, \varepsilon) \left[\frac{\eta_1^0}{2} s e^{ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} - \left(\frac{\eta_1^0 \varepsilon}{2 \delta} - iy_1 \right) \sin \left(r \frac{\delta}{\varepsilon} s \right) \right] \\ [-f_1^1 + f_2^1](s, y, \delta, \varepsilon) &= \\ & h_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} + g_1(y, \delta, \varepsilon) \left[\frac{\eta_1^0}{2} s e^{-ir \frac{\delta}{\varepsilon} s} - \left(\frac{\eta_1^0 \varepsilon}{2 \delta} + iy_1 \right) \sin \left(r \frac{\delta}{\varepsilon} s \right) \right]. \end{aligned}$$

On s'arrête alors au premier ordre, ce qui conduit à une erreur supplémentaire en

$$O\left(\frac{\varepsilon^2}{\delta} (|s| + \|y\|) |f_k^1|\right). \quad (4.46)$$

Dans chacun de ces cas, on a

1.

$$\begin{aligned} f_k &= O(g_k), \\ \nabla_y f_k &= O(|\nabla_y g_k| + |s| \cdot |g_k|), \\ \Delta_y f_k &= O(|\Delta_y g_k| + |s| \cdot |\nabla_y g_k| + s^2 |g_k|) \quad ; \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}
f_k &= O(|g_j|), \\
\nabla_y f_k &= O(|\nabla_y g_j| + (1 + |s| + \|y\|)|g_j|), \\
\Delta_y f_k &= O(|\Delta_y g_j| + (1 + |s| + \|y\|)|\nabla_y g_j| + (1 + s^2 + \|y\|^2)|g_j|) \quad ;
\end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned}
f_k^0 &= O(|g_j|), \\
\nabla_y f_k^0 &= O(|\nabla_y g_j|), \\
\Delta_y f_k^0 &= O(|\Delta_y g_j|), \\
f_k^1 &= O\left(\left(|s| + \frac{\varepsilon}{\delta} + \|y\|\right)|g_j| + |h_j|\right), \\
\nabla_y f_k^1 &= O\left(\left(|s| + \frac{\varepsilon}{\delta} + \|y\|\right)|\nabla_y g_j| + |\nabla_y h_j| + |g_j|\right), \\
\Delta_y f_k^1 &= O\left(\left(|s| + \frac{\varepsilon}{\delta} + \|y\|\right)|\Delta_y g_j| + |\Delta_y h_j| + |\nabla_y g_j|\right).
\end{aligned}$$

Il faudra donc suivant le cas imposer les conditions :

1. $g_k \in H^2(\Omega) \cap (1 + \|y\|^2)^{-1}L^2(\Omega)$;
2. $g_k \in H^2(\Omega) \cap (1 + \|y\|^2)^{-1}L^2(\Omega)$ et pour le gradient $\nabla_y g_k \in (1 + \|y\|^2)^{-1/2}L^2(\Omega)$;
3. $g_k \in H^2(\Omega) \cap (1 + \|y\|^2)^{-3/2}L^2(\Omega)$, $h_k \in H^2(\Omega) \cap (1 + \|y\|^2)^{-1}L^2(\Omega)$ et pour les dérivées $\nabla_y g_k \in (1 + \|y\|^2)^{-1/2}L^2(\Omega)$, $\Delta_y g_k \in (1 + \|y\|^2)^{-1/2}L^2(\Omega)$;

et dans tous les cas, il faudra avoir $(1 - F)g_k$ et $(1 - F)h_k$ et leurs dérivées spatiales jusqu'au second ordre de norme exponentiellement petite en ε pour que la contribution de la fonction de troncature soit négligeable par rapport aux autres termes d'erreur.

On conclut alors par le Lemme 1.3 en sommant, dans chaque cas, les erreurs (4.42), (4.44) et (4.45)/(4.46) puis en intégrant par rapport au temps s . \square

4.9 Le recollement

On rappelle seulement qu'on se limite au cas où $\Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon) = 0$ et $\Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon) = 1$.

4.9.1 Asymptotiques des vecteurs propres

Dans les deux régimes déjà évoqués dans la section 1.8.2, on dispose des asymptotiques suivantes.

Lemme 4.7 *On a, quand δ , ε et t tendent vers 0, pour $t < 0$,*

$$\begin{aligned}
\left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{A}}(t)\|}{\varepsilon} \right) [\Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta) - \psi_2(x, \delta)] \right\| &= O\left(|t| + \left| \frac{\delta}{t} \right|\right) \\
\left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{B}}(t)\|}{\varepsilon} \right) [\Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta) + \psi_1(x, \delta)] \right\| &= O\left(|t| + \left| \frac{\delta}{t} \right|\right),
\end{aligned}$$

et pour $t > 0$,

$$\begin{aligned}
\left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{A}}(t)\|}{\varepsilon} \right) [\Phi_{\mathcal{A}}^+(x, \delta) - \psi_1(x, \delta)] \right\| &= O\left(|t| + \left| \frac{\delta}{t} \right|\right) \\
\left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{B}}(t)\|}{\varepsilon} \right) [\Phi_{\mathcal{B}}^+(x, \delta) - \psi_2(x, \delta)] \right\| &= O\left(|t| + \left| \frac{\delta}{t} \right|\right)
\end{aligned}$$

uniformément en $\gamma \leq 1$, $|\varepsilon/(\gamma t)| \leq M$ et $|\delta/t| \leq M'$.

Lemme 4.8 On a, quand δ , ε et t tendent vers 0, pour $t < 0$,

$$\begin{aligned} \left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{A}}(t)\|}{\varepsilon} \right) \left[\Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta) - \frac{\sqrt{2}}{2}(\psi_1(x, \delta) + \psi_2(x, \delta)) \right] \right\| &= O \left(\delta + \left| \frac{t}{\delta} \right| \right) \\ \left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{B}}(t)\|}{\varepsilon} \right) \left[\Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta) - \frac{\sqrt{2}}{2}(-\psi_1(x, \delta) + \psi_2(x, \delta)) \right] \right\| &= O \left(\delta + \left| \frac{t}{\delta} \right| \right), \end{aligned}$$

et pour $t > 0$,

$$\begin{aligned} \left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{A}}(t)\|}{\varepsilon} \right) \left[\Phi_{\mathcal{A}}^+(x, \delta) - \frac{\sqrt{2}}{2}(\psi_1(x, \delta) + \psi_2(x, \delta)) \right] \right\| &= O \left(\delta + \left| \frac{t}{\delta} \right| \right) \\ \left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{B}}(t)\|}{\varepsilon} \right) \left[\Phi_{\mathcal{B}}^+(x, \delta) - \frac{\sqrt{2}}{2}(-\psi_1(x, \delta) + \psi_2(x, \delta)) \right] \right\| &= O \left(\delta + \left| \frac{t}{\delta} \right| \right), \end{aligned}$$

uniformément en $\gamma \leq 1$, $|\varepsilon/(\gamma t)| \leq M$ et $|t/\delta| \leq M'$.

Enfin, l'introduction de la phase dynamique dans les vecteurs propres ne perturbe pas l'asymptotique de manière significative comme le montre le lemme suivant.

Lemme 4.9 On a, quand δ , ε et t tendent vers 0, pour $\mathcal{C} = \mathcal{A}, \mathcal{B}$ et $*$ = +, −,

$$\left\| F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{C}}(t)\|}{\varepsilon} \right) \left[\Phi_{\mathcal{C}}^*(t, x, \delta) - e^{i\omega_{\mathcal{C}}^*(t, a^{\mathcal{C}}(t), \delta)} \Phi_{\mathcal{C}}^*(x, \delta) \right] \right\| = O \left(\frac{\varepsilon}{\gamma} \ln \frac{1}{|t| + \delta} \right)$$

uniformément en $\gamma \leq 1$ et $|\varepsilon/(\gamma t)| \leq M$.

Remarques 4.6

1. Les normes qui interviennent ici sont celles de $L^\infty(\Omega; \mathcal{H})$.
2. Les preuves de ces trois lemmes se trouvent en Annexe B.4.

4.9.2 Le presque croisement étroit ($\delta/\varepsilon \rightarrow 0$) : régime $|t|/\delta \rightarrow +\infty$.

Variation asymptotique du terme de phase semiclassique On a

$$\begin{aligned} S^{\mathcal{C}}(t) - S(t) &= \left(\eta^{0^{\mathcal{C}}}(\delta) - \eta^0(\delta) \right) \cdot \eta^0 t + O \left(|t|^3 + \frac{\delta^4}{t^2} \right) \\ &\quad - r\nu^{\mathcal{C}} \left[\operatorname{sgn}(t) \left(\eta_1^0 t^2 + \frac{\delta^2}{2\eta_1^0} + \frac{\delta^2}{\eta_1^{0^{\mathcal{C}}}(\delta)} \ln \left(\frac{2\eta_1^{0^{\mathcal{C}}}(\delta)|t|}{\delta} \right) \right) - \delta t \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a^{\mathcal{C}}(t) - a(t) &= \left(\eta^{0^{\mathcal{C}}}(\delta) - \eta^0(\delta) \right) t + O \left(|t|^3 + \frac{\delta^4}{t^2} \right) \\ &\quad - r\nu^{\mathcal{C}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \left[\frac{\operatorname{sgn}(t)}{2} \left(t^2 + \frac{\delta^2}{2\eta_1^{0^2}} + \frac{\delta^2}{\eta_1^{0^{\mathcal{C}}}(\delta)^2} \ln \left(\frac{2\eta_1^{0^{\mathcal{C}}}(\delta)|t|}{\delta} \right) \right) - \delta t \right], \end{aligned}$$

$$\eta^{\mathcal{C}}(t) - \eta(t) = \eta^{0^{\mathcal{C}}}(\delta) - \eta^0(\delta) - \frac{r\nu^{\mathcal{C}}}{\eta_1^0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} (\eta_1^0 |t| - \delta) + O \left(t^2 + \frac{\delta^2}{|t|} \right),$$

$$\begin{aligned} \eta^c(t).(a(t) - a^c(t)) &= \left(\eta^0(\delta) - \eta^{0c}(\delta) \right) . \eta^0 t + O \left(|t|^3 + \frac{\delta^4}{t^2} \right) \\ &\quad + r\nu^c \left[\frac{\text{sgn}(t)}{2} \left(\eta_1^0 t^2 + \frac{\delta^2}{2\eta_1^0} + \frac{\delta^2}{\eta_1^{0c}(\delta)} \ln \left(\frac{2\eta_1^{0c}(\delta)|t|}{\delta} \right) \right) - \delta t \right]. \end{aligned}$$

D'où,

$$\begin{aligned} &[S^c(t) + \eta^c(t).(x - a^c(t))] - [S(t) + \eta(t).(x - a(t))] \\ &= (S^c(t) - S(t)) + \eta^c(t).(a(t) - a^c(t)) + (\eta^c(t) - \eta(t)).\varepsilon y \\ &= O \left(|t|^3 + \frac{\delta^4}{t^2} + \left(t^2 + \frac{\delta^2}{|t|} \right) \varepsilon \|y\| \right) + (\eta^{0c}(\delta) - \eta^0(\delta)).\varepsilon y + r\nu^c \varepsilon y_1 \left(\frac{\delta}{\eta_1^0} - |t| \right) \\ &\quad - \frac{r\nu^c \text{sgn}(t)}{2} \left(\eta_1^0 t^2 + \frac{\delta^2}{2\eta_1^0} + \frac{\delta^2}{\eta_1^{0c}(\delta)} \ln \left(\frac{2\eta_1^{0c}(\delta)|t|}{\delta} \right) \right). \end{aligned} \quad (4.47)$$

Variation asymptotique des paquets d'onde On a

$$\begin{aligned} A^c(t) &= A_0 + O(t) \\ B^c(t) &= B_0 + \frac{ir\nu^c \text{sgn}(t)}{\eta_1^0} P A_0 + O \left(|t| + \frac{\delta^2}{t^2} \right) \\ &= B_0^c(\text{sgn}(t)) + O \left(|t| + \frac{\delta^2}{t^2} \right) \end{aligned}$$

et on note au passage que $(A_0, B_0^c(*))$ appartient à \mathcal{V} si c'est le cas pour (A_0, B_0) , d'où,

$$\begin{aligned} \psi_l \left(A^c(t), B^c(t), y + \frac{a(t) - a^c(t)}{\varepsilon} \right) &= \\ \psi_l(A_0, B_0^c(\text{sgn}(t)), y) &+ O \left(|t| + \frac{\delta^2}{t^2} + \frac{t^2}{\varepsilon} + \frac{\delta^2}{\varepsilon} \ln \left| \frac{t}{\delta} \right| \right) \end{aligned}$$

en norme L^2 en y .

Asymptotique de la solution hors croisement pour $t < 0$.

$$\begin{aligned} &\psi_E(t, x, \delta, \varepsilon) \\ &= \exp \left(i \frac{S^B(t)}{\varepsilon^2} \right) \varphi_l(A^B(t), B^B(t), \varepsilon^2, a^B(t), \eta^B(t), x) \Phi_{\mathcal{B}}^-(t, x, \delta) \\ &= -e^{\frac{i}{\varepsilon^2}[S(t) + \eta(t).(x - a(t))] - ir \left(\eta_1^0 \frac{t^2}{2\varepsilon^2} + \frac{t}{\varepsilon} y_1 \right)} \psi_l \left(A_0, B_0^B(-), \frac{x - a(t)}{\varepsilon} \right) e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(t, a^B(t), \delta)} \psi_1(x, \delta) \\ &\quad \times [1 + O(e_\varphi(t, \delta, \varepsilon, \gamma) + e_\psi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \varepsilon) + e_\omega(t, \delta, \varepsilon, \gamma))] \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} e_\varphi(t, \delta, \varepsilon, \gamma) &= \frac{|t|^3}{\varepsilon^2} + \frac{t^2}{\varepsilon\gamma} + \frac{\delta^2}{\varepsilon^2} \ln \left| \frac{t}{\delta} \right| + \frac{\delta}{\varepsilon\gamma}, \quad e_\psi(t, \delta, \varepsilon) = |t| + \frac{\delta^2}{t^2} + \frac{t^2}{\varepsilon} + \frac{\delta^2}{\varepsilon} \ln \left| \frac{t}{\delta} \right|, \\ e_\Phi(t, \delta) &= |t| + \frac{\delta}{|t|}, \quad e_E(t, \varepsilon) = \varepsilon \ln \left| \frac{1}{t} \right| + \frac{\varepsilon^2}{t^2} + \frac{\varepsilon^4}{|t|^3}, \quad e_\omega(t, \delta, \varepsilon, \gamma) = \frac{\delta\varepsilon}{\gamma|t|} + \frac{\varepsilon}{\gamma} \ln \left| \frac{1}{t} \right| \end{aligned}$$

sont les erreurs commises sur, respectivement, la phase $S(t) + \eta(t).(x - a(t))$, la fonction de Hermite ψ_l , la fonction propre $\Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta)$ (cf. Lemme 4.7), la solution approchée globale (cf. Lemme 4.5) et la phase corrigée $\omega_{\mathcal{B}}^-(t, x, \delta)$ (cf. Lemme 4.9).

Asymptotique de la solution pendant le croisement.

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_I(s, y, \delta, \varepsilon) &= \exp\left(i\frac{S(\varepsilon s)}{\varepsilon^2} + i\frac{\eta(\varepsilon s) \cdot y}{\varepsilon}\right) \\ &\times \sum_{k=1,2} g_k(y, \delta, \varepsilon) e^{(-1)^k ir(\eta_1^0 \frac{s^2}{2} + sy_1)} \psi_k(a(\varepsilon s) + \varepsilon y, \delta) [1 + O(e_I(\varepsilon s, \delta, \varepsilon))] \end{aligned}$$

où $e_I(t, \delta, \varepsilon) = |t| + \frac{|t|^3}{\varepsilon^2} + \frac{|t|\delta}{\varepsilon^2} + \frac{t^2}{\varepsilon}$ est l'erreur donnée par le Lemme 4.6.

Recollement pour $t < 0$. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent à

$$O(e_\varphi(t, \delta, \varepsilon, \gamma) + e_\psi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \varepsilon) + e_\omega(t, \delta, \varepsilon, \gamma) + e_I(t, \delta, \varepsilon))$$

près à condition de choisir

$$\begin{aligned} g_1(y, \delta, \varepsilon) &= -\psi_l(A_0, B_0^{\mathcal{B}}(-), y) e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{B}}(-t_r(\delta, \varepsilon)), \delta)} \\ g_2(y, \delta, \varepsilon) &= 0. \end{aligned}$$

Asymptotique de la solution hors croisement pour $t > 0$.

$$\psi_S(t, x, \delta, \varepsilon) = \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A}, \mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \exp\left(i\frac{S^{\mathcal{C}}(t)}{\varepsilon^2}\right) \varphi_l^{\mathcal{C}}(t, \varepsilon, x) \Phi_{\mathcal{C}}^+(t, x, \delta)$$

a pour asymptotique

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\varepsilon^2}[S(t)+\eta(t) \cdot (x-a(t))]} [1 + O(e_\varphi(t, \delta, \varepsilon, \gamma) + e_\psi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \varepsilon) + e_\omega(t, \delta, \varepsilon, \gamma))] \\ \times \sum_{(\mathcal{C}, k)=(\mathcal{A}, 1), (\mathcal{B}, 2)} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) e^{(-1)^k ir\left(\eta_1^0 \frac{t^2}{2\varepsilon^2} + \frac{t}{\varepsilon} y_1\right)} \psi_l\left(A_0, B_0^{\mathcal{C}}(+), \frac{x-a(t)}{\varepsilon}\right) e^{i\omega_{\mathcal{C}}^+(t, a^{\mathcal{C}}(t), \delta)} \psi_k(x, \delta). \end{aligned}$$

Recollement pour $t > 0$. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent avec la même erreur que pour $t < 0$ à condition de choisir

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) &= e^{i[\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{B}}(-t_r(\delta, \varepsilon)), \delta) - \omega_{\mathcal{A}}^+(t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{A}}(t_r(\delta, \varepsilon)), \delta)]} \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) &= 0. \end{aligned}$$

L'erreur commise est alors en $o(1)$ si on peut choisir $t = t_r(\delta, \varepsilon) \in [t_e(\delta, \varepsilon), t_i(\delta, \varepsilon)]$ et $\gamma = \gamma(\delta, \varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$\delta, \frac{\varepsilon}{\gamma} \ll t \ll \varepsilon^{2/3}, \sqrt{\varepsilon\gamma}, \frac{\varepsilon^2}{\delta} \text{ et } \varepsilon^{1/3}, \frac{\delta}{\varepsilon} \ll \gamma \ll 1$$

qui est bien une zone non vide.

Complément pour faire le recollement au premier ordre. En choisissant

$$\eta^{0^{\mathcal{C}}}(\delta) = \eta^0(\delta) - \frac{r\nu^{\mathcal{C}}}{\eta_1^0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \delta,$$

on remplace l'erreur en $\frac{\delta}{\varepsilon\gamma}$ dans $e_\varphi(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$ par $\frac{\delta^2}{\varepsilon\gamma|t|}$ (cf. (4.47), mais surtout on garantit la conservation de l'énergie totale à l'origine au premier ordre

$$\left[\frac{\|\eta^{0^A}(\delta)\|^2}{2} - E_{\mathcal{A}}(0, \delta) \right] - \left[\frac{\|\eta^{0^B}(\delta)\|^2}{2} - E_{\mathcal{B}}(0, \delta) \right] = O(\delta^2) \quad ;$$

on raffine la résolution de (4.43) en prenant

$$f_1(s, y, \delta, \varepsilon) = \tag{4.48}$$

$$e^{-ir(\eta_1^0 \frac{s^2}{2} + sy_1)} \left[g_1(y, \delta, \varepsilon) + \frac{\delta}{\varepsilon} \left(h_1(y, \delta, \varepsilon) - irg_2(y, \delta, \varepsilon) \int_{-\infty}^s e^{ir(\eta_1^0 \sigma^2 + 2\sigma y_1)} d\sigma \right) \right]$$

$$f_2(s, y, \delta, \varepsilon) = \tag{4.49}$$

$$e^{ir(\eta_1^0 \frac{s^2}{2} + sy_1)} \left[g_2(y, \delta, \varepsilon) + \frac{\delta}{\varepsilon} \left(h_2(y, \delta, \varepsilon) + irg_1(y, \delta, \varepsilon) \int_{-\infty}^s e^{-ir(\eta_1^0 \sigma^2 + 2\sigma y_1)} d\sigma \right) \right]$$

avec $g_k, h_k \in H^2(\Omega) \cap (1 + \|y\|^2)^{-1} L^2(\Omega)$, ainsi on remplace le terme d'erreur en $\frac{|t|\delta}{\varepsilon^2}$ dans $e_I(t, \delta, \varepsilon)$ par $\frac{\delta^2}{\varepsilon}$; le recollement pour $t < 0$ est possible si on choisit

$$\begin{aligned} g_1(y, \delta, \varepsilon) &= -\psi_l(A_0, B_0^{\mathcal{B}}(-), y) e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{B}}(-t_r(\delta, \varepsilon)), \delta)} \\ g_2(y, \delta, \varepsilon) &= 0 \\ h_1(y, \delta, \varepsilon) &= 0 \\ h_2(y, \delta, \varepsilon) &= 0 \quad ; \end{aligned}$$

le recollement pour $t > 0$ est possible (l'identité

$$\psi_l(A_0, B_0^{\mathcal{B}}(-), y) = \exp\left(-i \frac{r}{\eta_1^0} y_1^2\right) \psi_l(A_0, B_0^{\mathcal{B}}(+), y)$$

provient du Lemme 3.14) si on choisit

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) &= e^{i[\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{B}}(-t_r(\delta, \varepsilon)), \delta) - \omega_{\mathcal{A}}^+(t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{A}}(t_r(\delta, \varepsilon)), \delta)]} \sqrt{1 - |\Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon)|^2} \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) &= -\frac{\delta}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\pi r}{\eta_1^0}} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{i[\omega_{\mathcal{B}}^-(-t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{B}}(-t_r(\delta, \varepsilon)), \delta) - \omega_{\mathcal{B}}^+(t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{B}}(t_r(\delta, \varepsilon)), \delta)]} \end{aligned}$$

et l'erreur commise est alors en $o(\frac{\delta}{\varepsilon})$ si on peut choisir $t = t_r(\delta, \varepsilon)$ et $\gamma = \gamma(\delta, \varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$\delta, \frac{\varepsilon}{\gamma}, \frac{\varepsilon^4}{\delta}, \frac{\varepsilon^{3/2}}{\delta^{1/2}}, \frac{\varepsilon^{5/3}}{\delta^{1/3}} \ll t \ll \delta^{1/3} \varepsilon^{1/3}, \sqrt{\delta} \gamma, \frac{\delta}{\varepsilon} \text{ et } \frac{\varepsilon^{2/3}}{\delta^{1/3}}, \frac{\varepsilon^{10/3}}{\delta^{5/3}}, \frac{\varepsilon^3}{\delta^2}, \frac{\varepsilon^8}{\delta^3}, \frac{\varepsilon^2}{\delta}, \delta \ll \gamma \ll 1$$

qui est bien une zone non vide si on a la condition supplémentaire $\delta/\varepsilon^{7/5} \rightarrow +\infty$ (la condition limite naturelle serait $\delta/\varepsilon^2 \rightarrow +\infty$, si on veut que le terme attendu du premier ordre en $O(\frac{\delta}{\varepsilon})$ ne soit pas masqué par l'erreur en $O(\varepsilon)$ du Théorème 4.1, la condition technique provient en fait de la méconnaissance de l'opérateur $h_0(x, \delta)$ au second ordre).

4.9.3 Le presque croisement critique ($\delta = \varepsilon$) : régime $|t|/\varepsilon \rightarrow +\infty$

On reprend en fait ici les calculs faits dans [HagJoye98].

Variation asymptotique du terme de phase semiclassique On a

$$\begin{aligned} & [S^c(t) + \eta^c(t).(x - a^c(t))] - [S(t) + \eta(t).(x - a(t))] = \\ & O\left(|t|^3 + \frac{\varepsilon^4}{t^2} + \left(t^2 + \frac{\varepsilon^2}{|t|}\right) \varepsilon \|y\| + \varepsilon^3\right) + \left(\eta^{0c}(\varepsilon) - \eta^0(\varepsilon)\right) .\varepsilon y + r\nu^c \varepsilon y_1 \left(\frac{\varepsilon}{\eta_1^0} - |t|\right) \\ & - \frac{r\nu^c \operatorname{sgn}(t)}{2} \left(\eta_1^0 t^2 + \frac{\varepsilon^2}{\eta_1^0} \left(\frac{1}{2} + \ln(2\eta_1^0)\right) + \frac{\varepsilon^2}{\eta_1^0} \ln \left|\frac{t}{\varepsilon}\right|\right). \end{aligned}$$

Variation asymptotique du paquet d'onde On a

$$\begin{aligned} A^c(t) &= A_0 + O(t) \\ B^c(t) &= B_0 + \frac{ir\nu^c \operatorname{sgn}(t)}{\eta_1^0} P A_0 + O\left(|t| + \frac{\varepsilon^2}{t^2}\right) \\ &= B_0^c(\operatorname{sgn}(t)) + O\left(|t| + \frac{\varepsilon^2}{t^2}\right) \end{aligned}$$

et on note encore que $(A_0, B_0^c(*))$ appartient à \mathcal{V} si c'est le cas pour (A_0, B_0) , d'où,

$$\begin{aligned} \psi_l\left(A^c(t), B^c(t), y + \frac{a(t) - a^c(t)}{\varepsilon}\right) &= \\ \psi_l(A_0, B_0^c(\operatorname{sgn}(t)), y) &+ O\left(|t| + \frac{\varepsilon^2}{t^2} + \frac{t^2}{\varepsilon} + \varepsilon \ln \left|\frac{t}{\varepsilon}\right|\right) \end{aligned}$$

en norme L^2 en y .

Asymptotique de la solution hors croisement pour $t < 0$. Si on choisit

$$\eta^{0c}(\varepsilon) = \eta^0(\varepsilon) - \varepsilon \frac{r\nu^c}{\eta_1^0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

on a

$$\begin{aligned} \psi_E(t, x, \delta, \varepsilon) &= -e^{\frac{i}{\varepsilon^2}[S(t) + \eta(t).(x - a(t))]} e^{-ir\left[\eta_1^0 \frac{t^2}{2\varepsilon^2} + \frac{t}{\varepsilon} y_1 + \frac{1}{4\eta_1^0}(1 + 2\ln(2\eta_1^0)) + \frac{1}{2\eta_1^0} \ln \left|\frac{t}{\varepsilon}\right|\right]} \\ &\times \psi_l\left(A_0, B_0^B(-), \frac{x - a(t)}{\varepsilon}\right) e^{i\omega_B^-(t, a^B(t), \varepsilon)} \psi_1(x, \varepsilon) \\ &[1 + O(e_\varphi(t, \varepsilon, \gamma) + e_\psi(t, \varepsilon) + e_\Phi(t, \varepsilon) + e_E(t, \varepsilon) + e_\omega(t, \varepsilon, \gamma))] \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} e_\varphi(t, \varepsilon, \gamma) &= \frac{|t|^3}{\varepsilon^2} + \frac{t^2}{\varepsilon\gamma} + \frac{\varepsilon}{\gamma|t|}, \quad e_\psi(t, \varepsilon) = |t| + \frac{\varepsilon^2}{t^2} + \frac{t^2}{\varepsilon} + \varepsilon \ln \left|\frac{t}{\varepsilon}\right|, \\ e_\Phi(t, \varepsilon) &= |t| + \frac{\varepsilon}{|t|}, \quad e_E(t, \varepsilon) = \varepsilon \ln \left|\frac{1}{t}\right| + \frac{\varepsilon^2}{t^2} + \frac{\varepsilon^4}{|t|^3}, \quad e_\omega(t, \varepsilon, \gamma) = \frac{\varepsilon^2}{\gamma|t|} + \frac{\varepsilon}{\gamma} \ln \left|\frac{1}{t}\right| \end{aligned}$$

décrivent les mêmes erreurs que dans le cas du presque croisement étroit.

Asymptotique de la solution pendant le croisement pour $t < 0$.

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_I(s, y, \delta, \varepsilon) &= e^{\frac{i}{\varepsilon^2}(S(\varepsilon s) + \eta(\varepsilon s) \cdot \varepsilon y) - \frac{ir}{2\eta_1^0}(\eta_1^0 s + y_1)^2} [1 + O(e_I(\varepsilon s, \varepsilon) + e_D(\varepsilon s, \varepsilon, \gamma))] \\ &\times \sum_{k=1,2} g_k(y, \varepsilon) e^{(-1)^k \frac{ir}{2\eta_1^0} (\ln |s| + \frac{1}{2} \ln(2r\eta_1^0) + i\frac{\pi}{4})} \psi_k(a(\varepsilon s) + \varepsilon y, \varepsilon)\end{aligned}$$

où $e_I(t, \varepsilon) = |t| + \frac{|t|^3}{\varepsilon^2} + \frac{t^2}{\varepsilon}$ est l'erreur donnée par le Lemme 4.6 et $e_D(t, \varepsilon, \gamma) = \frac{\varepsilon}{\gamma|t|}$ celle correspondant aux asymptotiques des fonctions paraboliques cylindriques quand s tend vers l'infini (cf. [WhittWatson27]).

Recollement pour $t < 0$. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent à

$$O(e_\varphi(t, \varepsilon, \gamma) + e_\psi(t, \varepsilon) + e_\Phi(t, \varepsilon) + e_E(t, \varepsilon) + e_\omega(t, \varepsilon, \gamma) + e_I(t, \varepsilon) + e_D(t, \varepsilon, \gamma))$$

près à condition de choisir

$$\begin{aligned}g_1(y, \varepsilon) &= -\psi_l(A_0, B_0^B(-), y) e^{i\omega_B^-(-t_r(\varepsilon), a^B(-t_r(\varepsilon)), \varepsilon)} e^{-\frac{\pi r}{8\eta_1^0}} e^{\frac{ir}{2\eta_1^0} (y_1^2 - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln r)} \\ g_2(y, \varepsilon) &= 0.\end{aligned}$$

Asymptotique de la solution pendant le croisement pour $t > 0$ avec le choix ci-dessus.

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_I(s, y, \delta, \varepsilon) &= e^{\frac{i}{\varepsilon^2}(S(\varepsilon s) + \eta(\varepsilon s) \cdot \varepsilon y)} g_1(y, \varepsilon) [1 + O(e_I(\varepsilon s, \varepsilon) + e_D(\varepsilon s, \varepsilon, \gamma))] \\ &\times \sum_{k=1,2} e^{(-1)^k \frac{ir}{2\eta_1^0} [(\eta_1^0 s + y_1)^2 + \ln |s| + \frac{1}{2} \ln(2r\eta_1^0)]} \lambda_k \psi_k(a(\varepsilon s) + \varepsilon y, \varepsilon)\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= e^{-\frac{3\pi r}{8\eta_1^0}} \\ \lambda_2 &= e^{-\frac{\pi r}{8\eta_1^0}} e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{\pi r}{\eta_1^0}} \frac{1}{\Gamma(1 + \frac{ir}{2\eta_1^0})}.\end{aligned}$$

Asymptotique de la solution hors croisement pour $t > 0$.

$$\begin{aligned}\psi_S(t, x, \delta, \varepsilon) &= e^{\frac{i}{\varepsilon^2}(S(t) + \eta(t) \cdot (x - a(t)))} \\ &\times \sum_{(C,k)=(A,1),(B,2)} \Lambda_C^+(\delta = \varepsilon, \varepsilon) e^{(-1)^k ir\mu(t,y,\varepsilon)} \psi_l \left(A_0, B_0^C(+), \frac{x - a(t)}{\varepsilon} \right) e^{i\omega_C^+(t, a^C(t), \varepsilon)} \psi_k(x, \varepsilon) \\ &\times [1 + O(e_\varphi(t, \varepsilon, \gamma) + e_\psi(t, \varepsilon) + e_\Phi(t, \varepsilon) + e_E(t, \varepsilon) + e_\omega(t, \varepsilon, \gamma))]\end{aligned}$$

où $\mu(t, y, \varepsilon) = \eta_1^0 \frac{t^2}{2\varepsilon^2} + \frac{t}{\varepsilon} y_1 + \frac{1}{4\eta_1^0} (1 + 2 \ln(2\eta_1^0)) + \frac{1}{2\eta_1^0} \ln \left| \frac{t}{\varepsilon} \right|$.

Recollement pour $t > 0$. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent avec la même erreur que pour $t < 0$ à condition de choisir

$$\begin{aligned}\Lambda_A^+(\delta = \varepsilon, \varepsilon) &= -e^{i[\omega_B^-(-t_r(\varepsilon), a^B(-t_r(\varepsilon)), \varepsilon) - \omega_A^+(t_r(\varepsilon), a^A(t_r(\varepsilon)), \varepsilon)]} e^{\frac{ir}{4\eta_1^0} \ln(2\eta_1^0)} e^{-\frac{\pi r}{2\eta_1^0}} \\ \Lambda_B^+(\delta = \varepsilon, \varepsilon) &= -e^{i[\omega_B^-(-t_r(\varepsilon), a^B(-t_r(\varepsilon)), \varepsilon) - \omega_B^+(t_r(\varepsilon), a^B(t_r(\varepsilon)), \varepsilon)]} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{-\frac{ir}{2\eta_1^0} (1 + \frac{1}{2} \ln(2\eta_1^0) - \ln r)} \\ &\times \sqrt{\frac{\pi r}{\eta_1^0}} \frac{1}{\Gamma(1 + \frac{ir}{2\eta_1^0})} e^{-\frac{\pi r}{4\eta_1^0}}.\end{aligned}$$

L'erreur commise est alors en $o(1)$ si on peut choisir $t = t_r(\varepsilon) \in [t_e(\delta = \varepsilon, \varepsilon), t_i(\delta = \varepsilon, \varepsilon)]$ et $\gamma = \gamma(\varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$\frac{\varepsilon}{\gamma} \ll t \ll \varepsilon^{2/3}, \sqrt{\varepsilon\gamma} \text{ et } \varepsilon^{1/3} \ll \gamma \ll 1$$

qui est bien une zone non vide.

De plus, l'erreur est même en $O(\varepsilon^q)$ pour tout $q \in]0, \frac{1}{4}[$ (si on choisit $t_r(\varepsilon) = \varepsilon^{3/4}$ et $\gamma(\varepsilon) = \varepsilon^p$ avec p très proche de 0, l'erreur est en $O(\varepsilon^{1/4-p} + \varepsilon^{1-p} \ln \varepsilon)$).

4.9.4 Le presque croisement large ($\delta/\varepsilon \rightarrow +\infty$) : régime $|t|/\delta \rightarrow 0$.

Variation asymptotique du terme de phase semiclassique On a

$$S^c(t) - S(t) = \left(\eta^{0^c}(\delta) - \eta^0(\delta) \right) \cdot \eta^0 t + O\left(\delta^2 |t| + \frac{t^4}{\delta^2} \right) - r\nu^c \left[\frac{\eta_1^{0^2} t^3}{3\delta} + \delta t \right],$$

$$a^c(t) - a(t) = \left(\eta^{0^c}(\delta) - \eta^0(\delta) \right) t - \frac{r\nu^c \eta_1^0}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \frac{t^3}{\delta} + O\left(\delta^2 |t| + \frac{t^4}{\delta^2} \right),$$

$$\eta^c(t) - \eta(t) = \eta^{0^c}(\delta) - \eta^0(\delta) - \frac{r\nu^c \eta_1^0}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \frac{t^2}{\delta} + O\left(\delta |t| + \frac{t^4}{\delta^3} \right),$$

$$\eta^c(t) \cdot (a(t) - a^c(t)) = \left(\eta^0(\delta) - \eta^{0^c}(\delta) \right) \cdot \eta^0 t + r\nu^c \frac{\eta_1^{0^2} t^3}{6\delta} + O\left(\delta^2 |t| + \frac{t^4}{\delta^2} \right).$$

D'où,

$$\begin{aligned} [S^c(t) + \eta^c(t) \cdot (x - a^c(t))] - [S(t) + \eta(t) \cdot (x - a(t))] &= -r\nu^c \left[\delta t + \frac{\eta_1^{0^2} t^3}{6\delta} + \frac{\eta_1^0 t^2 \varepsilon}{2\delta} y_1 \right] \\ &+ \left(\eta^{0^c}(\delta) - \eta^0(\delta) \right) \cdot \varepsilon y + O\left(\delta^2 |t| + \frac{t^4}{\delta^2} + \left(\frac{t^4}{\delta^3} + \delta |t| \right) \varepsilon \|y\| \right) \end{aligned}$$

et on fait disparaître le dernier terme qui donnerait lieu à une erreur d'ordre $O(\frac{\delta}{\varepsilon\gamma})$ en choisissant $\eta^{0^B}(\delta) = \eta^0(\delta)$ (ce qui revient à dire qu'on anticipe le fait que seul le niveau $E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$ va importer et qu'en conséquence la dynamique classique "moyenne" est choisie avec les mêmes conditions initiales que celles du niveau $E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$, quant à la dynamique classique du niveau $E_{\mathcal{A}}(x, \delta)$, elle ne va en fait jamais intervenir par la suite);

Variation asymptotique du paquet d'onde On a

$$\begin{aligned} A^c(t, \delta) &= A_0 + O(t) \\ B^c(t, \delta) &= B_0 + O\left(|t| + \delta + \frac{|t|}{\delta} \right), \end{aligned}$$

d'où,

$$\begin{aligned} \psi_l \left(A^c(t), B^c(t), y + \frac{a(t) - a^c(t)}{\varepsilon} \right) = \\ \psi_l(A_0, B_0, y) + O \left(|t| + \delta + \frac{|t|}{\delta} + \frac{\delta^2 |t|}{\varepsilon} + \frac{|t|^3}{\delta \varepsilon} \right) \end{aligned}$$

en norme L^2 en y .

Asymptotique de la solution hors croisement pour $t < 0$.

$$\psi_E(t, x, \delta, \varepsilon) = \exp \left(i \frac{S^B(t)}{\varepsilon^2} \right) \varphi_l(A^B(t), B^B(t), \varepsilon^2, a^B(t), \eta^B(t), x) \Phi_{\mathcal{B}}^-(t, x, \delta)$$

a pour asymptotique

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\varepsilon^2}[S(t)+\eta(t)\cdot(x-a(t))]} e^{ir\frac{\delta}{\varepsilon}t} \psi_l \left(A_0, B_0, \frac{x - a(t)}{\varepsilon} \right) e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(t, a^B(t), \delta)} \frac{\sqrt{2}}{2} [-\psi_1(x, \delta) + \psi_2(x, \delta)] \\ \times [1 + O(e_\varphi(t, \delta, \varepsilon, \gamma) + e_\psi(t, \varepsilon, \gamma) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \varepsilon) + e_\omega(t, \delta, \varepsilon, \gamma))] \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} e_\varphi(t, \delta, \varepsilon, \gamma) &= \frac{\delta^2 |t|}{\varepsilon^2} + \frac{|t|^3}{\delta \varepsilon^2} + \frac{t^2}{\delta \varepsilon \gamma} + \frac{\delta |t|}{\varepsilon \gamma}, & e_\psi(t, \delta, \varepsilon) &= |t| + \delta + \frac{|t|}{\delta} + \frac{\delta^2 |t|}{\varepsilon} + \frac{|t|^3}{\delta \varepsilon}, \\ e_\Phi(t, \delta) &= \delta + \frac{|t|}{\delta}, & e_E(t, \varepsilon) &= \varepsilon \ln \frac{1}{\delta} + \frac{\varepsilon^2}{\delta^2}, & e_\omega(t, \delta, \varepsilon, \gamma) &= \frac{\delta \varepsilon}{\gamma |t|} + \frac{\varepsilon}{\gamma} \ln \frac{1}{\delta} \end{aligned}$$

décrivent les mêmes erreurs que dans le cas du presque croisement étroit.

Asymptotique de la solution pendant le croisement.

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_I(s, y, \delta, \varepsilon) &= e^{\frac{i}{\varepsilon^2}S(\varepsilon s) + \frac{i}{\varepsilon}\eta(\varepsilon s)\cdot y} [1 + O(e_I(\varepsilon s, \delta, \varepsilon))] \\ &\times \left[g_1(y, \delta, \varepsilon) e^{-ir\frac{\delta}{\varepsilon}s} (\psi_1 + \psi_2) + g_2(y, \delta, \varepsilon) e^{ir\frac{\delta}{\varepsilon}s} (-\psi_1 + \psi_2) \right] (a(\varepsilon s) + \varepsilon y, \delta) \end{aligned}$$

où $e_I(t, \delta, \varepsilon) = \frac{\delta^2 |t|}{\varepsilon^2} + \frac{|t|}{\delta} + \frac{t^2}{\delta \varepsilon} + \frac{|t|^3}{\delta \varepsilon^2}$ est l'erreur donnée par le Lemme 4.6.

Recollement pour $t < 0$. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent à

$$O(e_\varphi(t, \delta, \varepsilon, \gamma) + e_\psi(t, \delta, \varepsilon) + e_\Phi(t, \delta) + e_E(t, \varepsilon) + e_\omega(t, \delta, \varepsilon, \gamma) + e_I(t, \delta, \varepsilon))$$

près à condition de choisir

$$\begin{aligned} g_1(y, \delta, \varepsilon) &= 0 \\ g_2(y, \delta, \varepsilon) &= \frac{\sqrt{2}}{2} \psi_l(A_0, B_0, y) e^{i\omega_{\mathcal{B}}^-(t_r(\delta, \varepsilon), a^B(-t_r(\delta, \varepsilon)), \delta)}. \end{aligned}$$

Asymptotique de la solution hors croisement pour $t > 0$.

$$\psi_S(t, x, \delta, \varepsilon) = \sum_{\mathcal{C}=\mathcal{A},\mathcal{B}} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) \exp\left(i \frac{S^{\mathcal{C}}(t)}{\varepsilon^2}\right) \varphi_l(A^{\mathcal{C}}(t), B^{\mathcal{C}}(t), \varepsilon^2, a^{\mathcal{C}}(t), \eta^{\mathcal{C}}(t), x) \Phi_{\mathcal{C}}^+(t, x, \delta)$$

a pour asymptotique

$$\begin{aligned} & e^{\frac{i}{\varepsilon^2}(S(t)+\eta(t).(x-a(t)))} \psi_l\left(A_0, B_0, \frac{x-a(t)}{\varepsilon}\right) \\ & \times \sum_{(\mathcal{C},k)=(\mathcal{A},1),(\mathcal{B},2)} \Lambda_{\mathcal{C}}^+(\delta, \varepsilon) e^{(-1)^k i r \frac{\delta}{\varepsilon}} e^{i \omega_{\mathcal{C}}^+(t, a^{\mathcal{C}}(t), \delta)} \frac{\sqrt{2}}{2} \left((-1)^{k-1} \psi_1(x, \delta) + \psi_2(x, \delta) \right) \\ & \times [1 + O(e_{\varphi}(t, \delta, \varepsilon, \gamma) + e_{\psi}(t, \delta, \varepsilon) + e_{\Phi}(t, \delta) + e_E(t, \varepsilon) + e_{\omega}(t, \delta, \varepsilon, \gamma))]. \end{aligned}$$

Recollement pour $t > 0$. Il est possible de recoller les deux solutions qui précèdent avec la même erreur que pour $t < 0$ à condition de choisir

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathcal{A}}^+(\delta, \varepsilon) &= 0 \\ \Lambda_{\mathcal{B}}^+(\delta, \varepsilon) &= e^{i[\omega_{\mathcal{B}}^-(t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{B}}(-t_r(\delta, \varepsilon)), \delta) - \omega_{\mathcal{B}}^+(t_r(\delta, \varepsilon), a^{\mathcal{B}}(t_r(\delta, \varepsilon)), \delta)]}. \end{aligned}$$

L'erreur commise est alors en $o(1)$ si on peut choisir $t = t_r(\delta, \varepsilon) \in [t_e(\delta, \varepsilon), t_i(\delta, \varepsilon)]$ et $\gamma = \gamma(\delta, \varepsilon)$ tendant vers 0 avec

$$\frac{\varepsilon}{\gamma} \ll t \ll \delta, \sqrt{\delta \varepsilon \gamma}, \frac{\varepsilon \gamma}{\delta}, \delta^{1/3} \varepsilon^{2/3}, \frac{\varepsilon}{\sqrt{\delta}} \text{ et } \frac{\varepsilon^{1/3}}{\delta^{1/3}}, \sqrt{\delta} \ll \gamma \ll 1$$

qui est bien une zone non vide.

Enfin, contrairement au cas du presque croisement étroit, cette méthode ne semble pas permettre d'obtenir un résultat au premier ordre car le terme en $\frac{|t|^3}{\delta \varepsilon^2}$ dans $e_I(t, \delta, \varepsilon)$ provient de la méconnaissance de l'opérateur $h_0(x, \delta)$ au second ordre et il ne peut être en $o\left(\frac{\varepsilon}{\delta}\right)$ compte tenu de la condition $\varepsilon/(\gamma t)$ borné. \square

Chapitre 5

Approximation de Born-Oppenheimer indépendante du temps

Introduction

On s'intéresse maintenant à l'approximation de Born-Oppenheimer dans un cadre statique et unidimensionnel à savoir trouver un couple quasimode/quasi-énergie ψ^{\hbar}/E^{\hbar} pour l'opérateur

$$H_{\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + h(x) \quad (5.1)$$

i.e. une fonction vectorielle et un réel tels que

$$\left(H_{\hbar} - E^{\hbar} \right) \psi^{\hbar} = O(\hbar^p) \quad (5.2)$$

$$\|\psi^{\hbar}\| = 1 + O(\hbar^q) \quad (5.3)$$

$$E^{\hbar} = E_0 + \hbar E_1 + O(\hbar^2) \quad (5.4)$$

avec $p > 1$ et $q > 0$, dans cette situation, on parle d'ailleurs d'un *quasimode d'ordre p* . Les conséquences spectrales de l'existence de tels quasimodes sont les suivantes : le spectre de H_{\hbar} possède une intersection non vide avec un intervalle du type $[E^{\hbar} - C\hbar^p, E^{\hbar} + C\hbar^p]$. Par contre, il est rare que la fonction ψ^{\hbar} soit proche d'un vecteur propre de H_{\hbar} (on peut avoir du spectre continu et donc aucun vecteur propre), c'est toutefois le cas si on suppose que le spectre est discret et suffisamment espacé.

Dans le cas scalaire où $h(x)$ est une fonction à valeurs réelles, la recherche de quasimodes possède une longue histoire et se regroupe essentiellement autour de deux méthodes. On retrouve la méthode B.K.W. dans la plupart des ouvrages de physique quantique (cf. [Borowitz67] Section 8.3 par exemple), à cause des problèmes de caustiques, elle est souvent complétée par des recollements basés sur la fonction d'Airy qui permet de passer de la zone classiquement permise à la zone classiquement interdite. La deuxième méthode consiste à intégrer une fonction d'onde qui se propage le long d'une orbite classique périodique (cf. [Ralston76], [PaulUribe93], [Khuat-Duy96], [Paul97], [HagRob98], [Bily01], ...) C'est celle-ci que nous avons voulu adapter ici pour pouvoir traiter des hamiltoniens $h(x)$ matriciels et en particulier qui présentent des croisements de valeurs propres. Avec la méthode B.K.W., on citera [ColinPinel03] qui donne la règle de Bohr-Sommerfeld à tout ordre en \hbar et [Pollet97] qui donne des résultats pour des situations dites d'*anticroisement*.

On signale par ailleurs que dans le cas multidimensionnel, sous l'hypothèse de complète intégrabilité et de périodicité du flot sur chaque surface d'énergie, il existe aussi des constructions de quasimodes basées sur cette technique (cf. [Ralston76], [Bily01], ...) et que, dans le cas unidimensionnel et scalaire, le problème posé par les potentiels à puits multiples a été résolu dans [ColinParisse99].

Les résultats obtenus dans ce chapitre concernent des hamiltoniens matriciels (hermitiens) avec ou sans croisement de valeurs propres. En ce qui concerne les situations de presque croisement, les résultats sont encore trop partiels pour être explicitement mentionnés dans cette dissertation. On signale par ailleurs que, compte tenu des asymptotiques à la Weyl obtenues dans [Balazard85], il apparaît qu'on a obtenu "presque tous" les quasimodes associés au problème même dans les situations de croisement de valeurs propres.

5.1 Rappel sur la construction de quasimodes dans le cas scalaire

On se place ici dans la situation où \mathcal{H} est de dimension 1 si bien que $h(x)$ est juste une fonction scalaire (on adopte dès lors la notation $V(x)$) et on suppose qu'on a les hypothèses suivantes :

- (V1) V est de classe \mathcal{C}^5 ,
- (V2) V est borné inférieurement,
- (V3) il existe des constantes strictement positives C et M telles que

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad |V(x)| \leq C e^{Mx^2}.$$

On pose encore

$$V_{\pm} = \liminf_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) \in]-\infty, +\infty],$$

et on cherche un couple quasimode/quasi-énergie (ψ^h, E^h) pour l'opérateur

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{5.5}$$

avec E^h proche d'une valeur E_0 qui vérifie :

- (E1) $E_0 < \min(V_{\pm})$,
- (E2) une des composantes connexes de la courbe d'énergie

$$\Gamma(E_0) = \{(q, p) \in \mathbb{R}^2 / H(q, p) = \frac{1}{2}p^2 + V(q) = E_0\}$$

associée à E_0 est compacte et \mathcal{C}^2 en tant que sous-variété de \mathbb{R}^2 (autrement dit sa projection sur l'axe des positions est un intervalle compact $[q_-, q_+]$ et $q_- < q_+$ sont deux racines consécutives de $V(q) = E_0$ avec $V'(q_-) < 0$ et $V'(q_+) > 0$), on la notera $\gamma(E_0)$.

Soit alors $(a_0, \eta_0) \in \gamma(E_0)$, il est connu que la trajectoire classique pour une telle condition initiale est périodique de période notée $\tau(E_0)$ et que c'est le cas localement autour de (a_0, η_0) : on a une famille régulière de courbes $\gamma(E)$ correspondant à une trajectoire classique sur l'intervalle $[q_-(E), q_+(E)]$ de période $\tau(E)$.

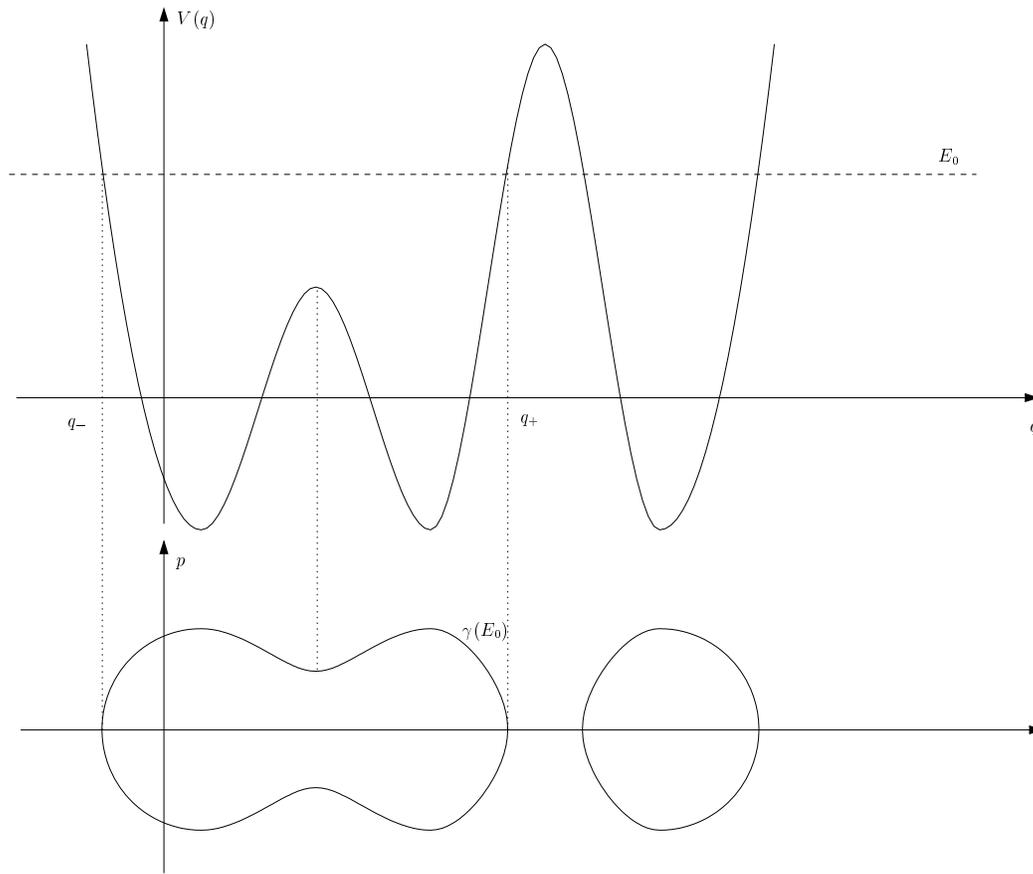


FIG. 5.1 – Trajectoire classique dans l'espace des phases pour un potentiel à trois puits.

D'ailleurs, si on note

$$I(E) = \int_{\gamma(E)} pdq = 2 \int_{q_-(E)}^{q_+(E)} \sqrt{2(E - V(q))} dq = \int_{\frac{1}{2}p^2 + V(q) < E, q_-(E) \leq q \leq q_+(E)} dq dp$$

l'aire entourée par la courbe $\gamma(E)$, on a

$$\tau(E) = \frac{\partial I}{\partial E}(E) = 2 \int_{q_-(E)}^{q_+(E)} \frac{1}{\sqrt{2(E - V(q))}} dq = \int_{\gamma(E)} \frac{dq}{p}.$$

On pose enfin

$$\alpha(E) = \frac{1}{2\tau(E)} \frac{\partial \tau}{\partial E}(E).$$

Avec toutes ces notations, on peut alors rappeler, sans rappel de preuve, le Théorème 1 de [HagRob98].

Théorème 5.1 Soient V et E_0 vérifiant les hypothèses (V1)-(V3) et (E1)-(E2). Soit $(a(t), \eta(t), A(t), B(t), S(t))$ la solution du système différentiel

$$\begin{cases} \dot{a}(t) &= \eta(t) \\ \dot{\eta}(t) &= -V'(a(t)) \\ \dot{A}(t) &= iB(t) + 2\alpha(E_0)\eta(t)[V'(a(t))A(t) + i\eta(t)B(t)] \\ \dot{B}(t) &= iV''(a(t))A(t) + 2i\alpha(E_0)V'(a(t))[V'(a(t))A(t) + i\eta(t)B(t)] \\ \dot{S}(t) &= \frac{1}{2}\eta(t)^2 - V(a(t)) \end{cases} \quad (5.6)$$

de condition initiale

$$\begin{cases} a(0) &= a_0 \\ \eta(0) &= \eta_0 \\ A(0) &= A_0 \\ B(0) &= B_0 \\ S(0) &= 0 \end{cases}$$

où $(a_0, \eta_0) \in \gamma(E_0)$ et $(A_0, B_0) \in \mathcal{V}$. On pose

$$E^{\hbar} = E_0 + \frac{\pi}{\tau(E_0)} \hbar$$

et

$$\psi^{\hbar} = \hbar^{-1/4} \sqrt{\frac{|\theta|}{2\sqrt{\pi}\tau(E_0)}} \int_0^{\tau(E_0)} e^{\frac{i}{\hbar}(S(t)+tE^{\hbar})} \varphi_0(A(t), B(t), \hbar, a(t), \eta(t), x) dt \quad (5.7)$$

où

$$\theta = V'(a(t))A(t) + i\eta(t)B(t)$$

est une constante du mouvement. Alors, si (E_0, \hbar) vérifie la règle de Bohr-Sommerfeld

$$I(E_0) = S(\tau(E_0)) + E_0\tau(E_0) \in 2\pi\mathbb{N}\hbar, \quad (5.8)$$

ψ^{\hbar} est un quasimode d'ordre $3/2$ associé à E^{\hbar} , autrement dit

$$\|\psi^{\hbar}\| = 1 + O(\hbar)$$

$$(H_{\hbar} - E^{\hbar})\psi^{\hbar} = O(\hbar^{3/2}).$$

Remarques 5.1

1. En introduisant une fonction de troncature comme déjà mentionné dans le deuxième point des Remarques 3.16, on peut s'affranchir de l'hypothèse (V3).
2. Les termes dépendant de $\alpha(E_0)$ dans le système (5.6) constituent une modification du système habituel (3.28) qui permet de rendre périodique de période $\tau(E_0)$ les matrices $A(t)$ et $B(t)$. Cela revient à altérer localement l'hamiltonien $H(q, p) = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$ en le remplaçant par

$$f(H) = E_0 + (H - E_0) + \alpha(E_0)(H - E_0)^2.$$

Une telle transformation conserve la trajectoire classique associée à l'énergie E_0 , mais le flot linéarisé autour de cette trajectoire est légèrement altéré et devient périodique puisqu'on est en quelque sorte passé en coordonnées action-angle au second ordre. Pour plus de détails sur cette transformation, on peut consulter [HagRob98] et [HelfferRobert84].

3. L'égalité dans (5.8) est évidente en écrivant

$$\begin{aligned} S(\tau(E_0)) + E_0\tau(E_0) &= \int_0^{\tau(E_0)} \left[\frac{\eta(t)^2}{2} - V(a(t)) + E_0 \right] dt \\ &= \int_0^{\tau(E_0)} \eta(t)^2 dt \\ &= \int_{\gamma(E_0)} pdq. \end{aligned}$$

4. Bien que le flot et le flot linéarisé de l'hamiltonien modifié soient périodiques en temps, le paquet d'ondes $\varphi_0(A(t), B(t), \hbar, a(t), \eta(t), x)$ n'est pas périodique car il fait intervenir une détermination de la racine carrée de $A(t)$ qui n'est pas la même après une période, par contre, l'intégrande complète de (5.7) l'est grâce à la condition de Bohr-Sommerfeld (5.8) qui compense exactement le changement de signe de la racine carrée.

Pour terminer cette section, on va donner quelques outils techniques qui rentrent dans le cadre de la preuve du théorème précédent. Notamment, pour vérifier que le quasimode (5.7) est correctement normalisé, on est amené à calculer des produits scalaires du type

$$\left\langle \int_0^{\tau(E_0)} \kappa(t) \tilde{\varphi}_l(t, \hbar, x) dt, \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \tilde{\varphi}_k(t, \hbar, x) dt \right\rangle$$

où $l, k \in \mathbb{N}$ et $\kappa(t), \lambda(t)$ sont des fonctions C^3 périodiques et où on a utilisé la notation

$$\tilde{\varphi}_l(t, \hbar, x) = e^{\frac{i}{\hbar}(S(t)+tE^h)} \varphi_l(A(t), B(t), \hbar, a(t), \eta(t), x).$$

Avec un changement de variable évident et à cause de la périodicité (cf. dernier point des Remarques 5.1), on a

$$\begin{aligned} & \left\langle \int_0^{\tau(E_0)} \kappa(t_1) \tilde{\varphi}_l(t_1, \hbar, x) dt_1, \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t_2) \tilde{\varphi}_k(t_2, \hbar, x) dt_2 \right\rangle \\ &= \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} \langle \tilde{\varphi}_l(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_k(t, \hbar, x) \rangle ds dt. \end{aligned}$$

On va maintenant donner une version améliorée de la Proposition 5 de [HagRob98] qui va nous permettre d'évaluer au mieux les produits scalaires du type précédent.

Proposition 5.2 *Soient $f(t, s)$ et $g(t, s)$ deux fonctions à valeurs complexes respectivement de classe C^4 et C^6 pour $(t, s) \in [0, T] \times [-T/2, T/2]$. On suppose que pour tout $t \in [0, T]$, $g(t, 0) = 0$, $\frac{\partial g}{\partial s}(t, 0) = 0$ et $\frac{\partial^2 g}{\partial s^2}(t, 0) = \alpha(t)$ est réel et strictement positif et qu'il existe $r > 0$ tel que, pour tout $(t, s) \in [0, T] \times [-T/2, T/2]$, $\Re g(t, s) \geq rs^2$. Alors, pour tout $n \in \mathbb{N}$, on a*

$$\begin{aligned} & \int_0^T \left(\int_{-T/2}^{T/2} f(t, s) s^{2n} e^{-g(t, s)/\hbar} ds \right) dt = \frac{(2n)!}{2^n n!} \sqrt{2\pi} \hbar^{n+\frac{1}{2}} \int_0^T f(t, 0) \alpha(t)^{-n-\frac{1}{2}} dt \\ & + \frac{(2n+1)!}{2^n n!} \sqrt{2\pi} \hbar^{n+\frac{3}{2}} \left[\int_0^T \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial s^2}(t, 0) \alpha(t)^{-n-\frac{3}{2}} dt \right. \\ & - \frac{2n+3}{24} \int_0^T \left(f(t, 0) \frac{\partial^4 g}{\partial s^4}(t, 0) + 4 \frac{\partial f}{\partial s}(t, 0) \frac{\partial^3 g}{\partial s^3}(t, 0) \right) \alpha(t)^{-n-\frac{5}{2}} dt \\ & \left. + \frac{(2n+3)(2n+5)}{72} \int_0^T f(t, 0) \left(\frac{\partial^3 g}{\partial s^3}(t, 0) \right)^2 \alpha(t)^{-n-\frac{7}{2}} dt \right] + O\left(\hbar^{n+\frac{5}{2}}\right). \end{aligned}$$

Preuve cf. Annexe C.1. □

Corollaire 5.3 *Il existe des fonctions C^2 périodiques à valeurs réelles $h_1(t), h_2(t)$ telles qu'on a*

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} \langle \tilde{\varphi}_0(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_0(t, \hbar, x) \rangle ds dt \\ &= \frac{2\sqrt{\pi}}{|\theta|} \hbar^{1/2} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} dt + O\left(\hbar^{3/2}\right) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} & \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \frac{1}{\kappa(t+s)} \langle \tilde{\varphi}_1(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_1(t, \hbar, x) \rangle ds dt \\ &= \sqrt{\pi} \hbar^{3/2} \times \left[\int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} h_1(t) dt + i \int_0^{\tau(E_0)} \left[\lambda(t) \overline{\kappa'(t)} - \lambda'(t) \overline{\kappa(t)} \right] h_2(t) dt \right. \\ & \quad \left. - \frac{4}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda'(t) \overline{\kappa'(t)} dt \right] + O(\hbar^{5/2}). \end{aligned}$$

Preuve cf. Annexe C.2. □

5.2 Construction de quasimodes en situation sans croisement

On se place maintenant dans la situation où \mathcal{H} est de dimension 2 si bien que $h(x)$ est une matrice hermitienne 2×2 notée $V(x)$ et on suppose qu'on a (V1)-(V2). On suppose de plus qu'on a

(SC) *les valeurs propres de $V(x)$ sont distinctes pour tout x dans \mathbb{R} .*

On les note $E_1(x)$ et $E_2(x)$.

5.2.1 Réduction de l'hamiltonien à une forme diagonale à l'ordre dominant

De manière régulière en x , on peut alors construire une matrice unitaire $U(x)$ qui diagonalise $V(x)$

$$V(x) = U(x) \begin{pmatrix} E_1(x) & 0 \\ 0 & E_2(x) \end{pmatrix} U(x)^*$$

et telle que $U(x)^* U'(x)$ est nulle sur la diagonale (choix convenable des phases des vecteurs propres). On introduit alors, avec la notation d'opérateur fibré de [ReedSimonIV78], l'opérateur unitaire

$$U = \int_{\oplus} U(x) dx$$

et on calcule formellement

$$\tilde{H}_\hbar = U^* H_\hbar U = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \begin{pmatrix} E_1(x) & 0 \\ 0 & E_2(x) \end{pmatrix} - \hbar^2 U(x)^* U'(x) \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2} U(x)^* U''(x).$$

On garde alors à l'esprit que les fonctions sur lesquelles on va faire agir ce nouvel opérateur \tilde{H}_\hbar et l'opérateur initial H_\hbar sont dans $\mathcal{C}_c^2(\mathbb{R}; \mathbb{C}^2)$ et que ce sous-espace est préservé par U ce qui fait qu'il n'est pas nécessaire de se préoccuper précisément des domaines d'autoadjonction.

5.2.2 Quasimodes pour l'hamiltonien réduit

De manière un peu plus générale, on va chercher à produire des quasimodes pour des hamiltoniens du type

$$\tilde{H}_\hbar = H_0^\hbar + \frac{\hbar}{2} \left[C(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} C(x) \right] + \hbar^2 D(x) \quad (5.9)$$

où

$$H_0^{\hbar} = \begin{pmatrix} H_1^{\hbar} & 0 \\ 0 & H_2^{\hbar} \end{pmatrix}$$

$$H_j^{\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_j(x)$$

$$C(x) = C(x)^* = \begin{pmatrix} 0 & \overline{c(x)} \\ c(x) & 0 \end{pmatrix}$$

$$D(x) = D(x)^* = \begin{pmatrix} \frac{d_1(x)}{d(x)} & d(x) \\ \frac{d(x)}{d_2(x)} & d_2(x) \end{pmatrix}$$

(avec le choix des matrices

$$C(x) = -iU(x)^*U'(x), \quad D(x) = \frac{1}{2}U'(x)^*U'(x) = \frac{1}{2}C(x)^2$$

l'hamiltonien de la section précédente rentre dans cette classe).

La forme explicitement symétrique (5.9) ne nous sera pas utile par la suite, dorénavant on se servira de la forme ("quantifiée à gauche")

$$\tilde{H}_{\hbar} = H_0^{\hbar} + \hbar C(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hbar^2 R(x)$$

où

$$R(x) = D(x) - \frac{i}{2}C'(x)$$

qui facilitera le contrôle des termes faisant intervenir des dérivations.

Soit $E_0 \in \mathbb{R}$ telle qu'on a les hypothèses (E1)-(E2) avec $V(x) = E_1(x)$.

On se donne une fonction de troncature $F \in C^\infty(\mathbb{R}; [0, 1])$ telle que $F(x) = 1$ pour $|x| \leq 1$ et $F(x) = 0$ pour $|x| \geq 2$ et on introduit un petit paramètre γ que l'on choisira en fonction de \hbar .

Comme dans le cas scalaire, on introduit les quantités dynamiques classiques associées au niveau d'énergie $E_1(x)$ définies par le système d'équations différentielles dépendant du temps

$$\begin{cases} \dot{a}_1(t) &= \eta_1(t) \\ \dot{\eta}_1(t) &= -E_1'(a_1(t)) \\ \dot{A}_1(t) &= iB_1(t) + 2\alpha_1\theta_1\eta_1(t) \\ \dot{B}_1(t) &= iE_1''(a_1(t))A_1(t) + 2i\alpha_1\theta_1E_1'(a_1(t)) \\ \dot{S}_1(t) &= \frac{1}{2}\eta_1(t)^2 - E_1(a_1(t)) \end{cases} \quad (5.10)$$

où

$$\alpha_1 = \frac{\tau_1'(E_0)}{2\tau_1(E_0)}, \quad \theta_1 = E_1'(a_1(0))A_1(0) + i\eta_1(0)B_1(0) \quad (5.11)$$

et les conditions initiales vérifient

$$(a_1(0), \eta_1(0)) \in \gamma_1(E_0), \quad A_1(0)\overline{B_1(0)} + B_1(0)\overline{A_1(0)} = 2, \quad S_1(0) = 0. \quad (5.12)$$

On pose alors

$$E_1^{\hbar} = E_0 + \frac{\pi\hbar}{\tau_1(E_0)} \quad (5.13)$$

$$\psi^{\hbar} = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ 0 \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_1 \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

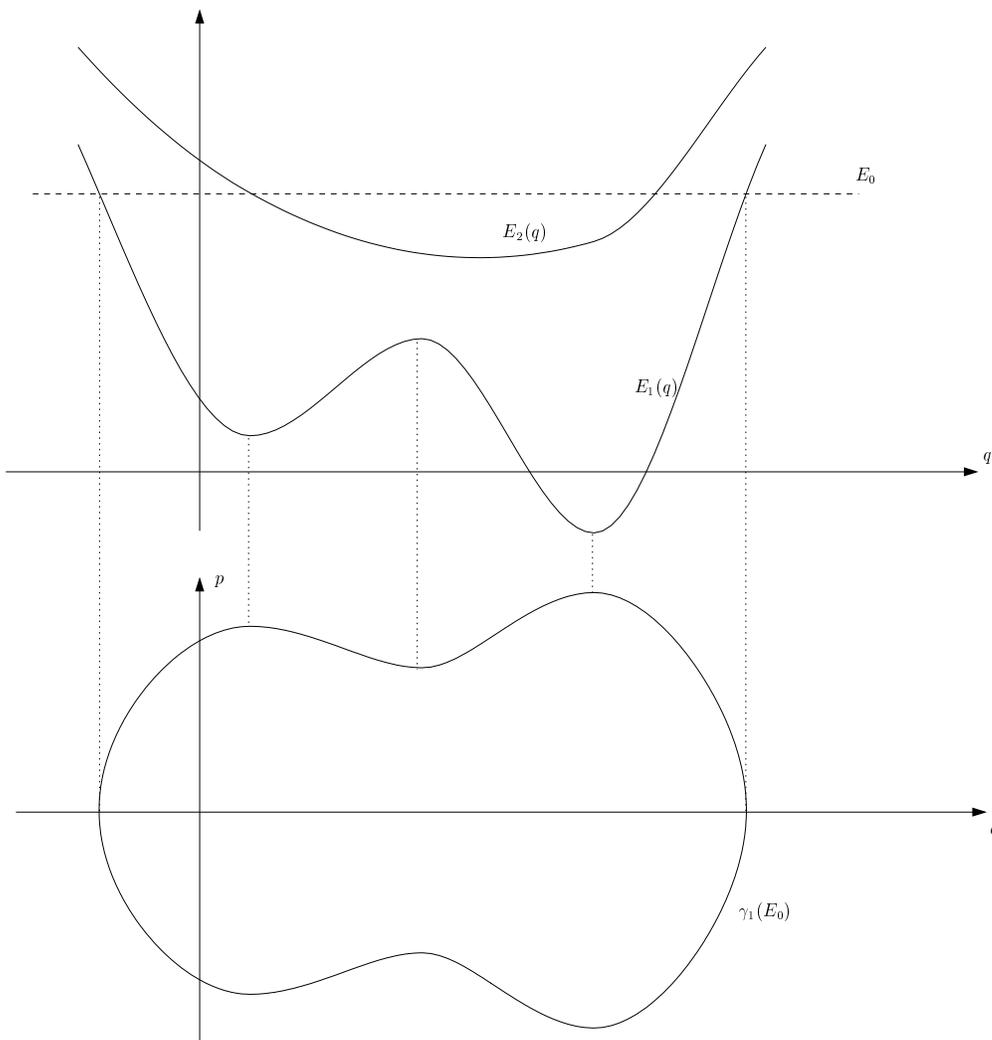


FIG. 5.2 – Trajectoire classique dans l'espace des phases pour deux potentiels qui ne se croisent pas.

avec

$$\psi_0(x) = \hbar^{-1/4} \int_0^{\tau_1(E_0)} \underline{F}\varphi_0(t, \hbar, \gamma, x) dt \quad (5.15)$$

$$\psi_1(x) = -\hbar^{-1/4} \int_0^{\tau_1(E_0)} \frac{\eta_1(t)c(a_1(t))}{E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t))} \underline{F}\varphi_0(t, \hbar, \gamma, x) dt \quad (5.16)$$

où on a allégé les écritures en posant, pour $l \in \mathbb{N}$,

$$\varphi_l(t, \hbar, x) = \varphi_l(A_1(t), B_1(t), \hbar, a_1(t), \eta_1(t), x),$$

$$\tilde{\varphi}_l(t, \hbar, x) = e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^\hbar)} \varphi_l(t, \hbar, x),$$

$$\underline{F}\varphi_l(t, \hbar, \gamma, x) = F\left(\gamma \frac{x - a_1(t)}{\sqrt{\hbar}}\right) \tilde{\varphi}_l(t, \hbar, x).$$

Théorème 5.4 Avec les hypothèses (V1)-(V2), (SC), (E1)-(E2) et les notations (5.10)-(5.16) ci-dessus et si de plus le couple (E_0, \hbar) vérifie la règle de Bohr-Sommerfeld

$$I_1(E_0) = S_1(\tau_1(E_0)) + E_0\tau_1(E_0) \in 2\pi\mathbb{N}\hbar,$$

alors ψ^{\hbar} vérifie

$$\|\psi^{\hbar}\|^2 = \frac{2\sqrt{\pi}\tau_1(E_0)}{|\theta_1|} + O(\hbar^{1/2})$$

et

$$(\tilde{H}_{\hbar} - E_1^{\hbar})\psi^{\hbar} = O(\hbar^{3/2}),$$

autrement dit, à une constante de normalisation près, ψ^{\hbar} est un quasimode d'ordre 3/2 pour \tilde{H}_{\hbar} .

Remarques 5.2

1. Le théorème reste valide si les deux valeurs propres $E_1(x)$ et $E_2(x)$ possèdent un croisement sur un intervalle disjoint de la projection en position de la trajectoire classique $\gamma_1(E_0)$ autrement dit il suffit d'avoir $E_1(a_1(t)) \neq E_2(a_1(t))$ pour tout temps t puisque tout se passe localement autour de la trajectoire classique.
2. Autrement dit, à l'ordre 3/2, les quasimodes de \tilde{H}_{\hbar} apparaissent découplés.
3. On introduit le terme correctif ψ_1 d'ordre \hbar pour compenser le terme (5.17) qui apparaît au premier ordre quand on fait agir $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ sur ψ_0 .

Preuve Calculons

$$\begin{aligned} (\tilde{H}_{\hbar} - E_1^{\hbar})\psi_{\hbar} &= \begin{pmatrix} (H_1^{\hbar} - E_1^{\hbar})\psi_0 \\ 0 \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ c(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_0}{\partial x} + (H_2^{\hbar} - E_1^{\hbar})\psi_1 \end{pmatrix} \\ &+ \hbar^2 \left[\begin{pmatrix} \overline{c(x)}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_1}{\partial x} \\ 0 \end{pmatrix} + R(x) \begin{pmatrix} \psi_0 \\ 0 \end{pmatrix} \right] + \hbar^3 R(x) \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Rappelons les notations et identités

$$V^{[n]}(x, a) = V(x) - \sum_{k=0}^{n-1} V^{(k)}(a) \frac{(x-a)^k}{k!},$$

$$\begin{aligned} H_1^{\hbar} - E_1^{\hbar} &= \eta_1(p_x - \eta_1) + E_1'(a_1)(x - a_1) \\ &\quad - \frac{\pi}{\tau_1(E_0)}\hbar + \frac{(p_x - \eta_1)^2}{2} + E_1''(a_1)\frac{(x - a_1)^2}{2} \\ &\quad + E_1^{[3]}(x, a_1), \\ H_2^{\hbar} - E_1^{\hbar} &= H_1^{\hbar} - E_1^{\hbar} + [E_2(x) - E_1(x)], \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} &= \eta_1 + (p_x - \eta_1). \end{aligned}$$

Pour le terme d'ordre dominant (en \hbar), on a

$$(H_1^{\hbar} - E_1^{\hbar})\psi_0 = O(\hbar^{3/2})$$

d'après le Théorème 5.1 (à l'introduction près de la fonction de troncature pour s'affranchir de l'hypothèse sur la croissance à l'infini du potentiel), et pour les ordres suivants

$$\begin{aligned} c(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_0}{\partial x} + (H_2^{\hbar} - E_1^{\hbar})\psi_1 &= \hbar^{-1/4} \int_0^{\tau_1(E_0)} e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^{\hbar})} \zeta_1(t, \hbar, x) dt \\ \overline{c(x)}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_1}{\partial x} &= \hbar^{-1/4} \int_0^{\tau_1(E_0)} e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^{\hbar})} \zeta_2(t, \hbar, x) dt \\ R(x) \begin{pmatrix} \psi_0 \\ 0 \end{pmatrix} &= \hbar^{-1/4} \int_0^{\tau_1(E_0)} e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^{\hbar})} \zeta_3(t, \hbar, x) dt \\ R(x) \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_1 \end{pmatrix} &= \hbar^{-1/4} \int_0^{\tau_1(E_0)} e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^{\hbar})} \zeta_4(t, \hbar, x) dt \end{aligned}$$

où, en ignorant les variables et paramètres,

$$\zeta_1(t, \hbar, x) = \eta_1 c(x) F \varphi_0 \quad (5.17)$$

$$+ i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} B_1 c(x) F \varphi_1 \quad (5.18)$$

$$- i \sqrt{\hbar} \gamma c(x) F' \varphi_0 \quad (5.19)$$

$$- i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} \eta_1 B_1 F \varphi_1 \quad (5.20)$$

$$- \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} E_1'(a_1) A_1 F \varphi_1 \quad (5.21)$$

$$+ \hbar \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} \frac{\pi}{\tau_1(E_0)} F \varphi_0 \quad (5.22)$$

$$- \frac{\hbar}{4} \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} \left[|B_1|^2 F \varphi_0 - B_1^2 \sqrt{2} F \varphi_2 \right] \quad (5.23)$$

$$- \frac{\hbar}{4} \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} E_1''(a_1) \left[|A_1|^2 F \varphi_0 + A_1^2 \sqrt{2} F \varphi_2 \right] \quad (5.24)$$

$$- \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} E_1^3(x, a_1) F \varphi_0 \quad (5.25)$$

$$- \eta_1 c(a_1) \frac{E_2(x) - E_1(x)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} F \varphi_0 \quad (5.26)$$

$$+ \frac{1}{2} \hbar \gamma^2 \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} F'' \varphi_0 \quad (5.27)$$

$$+ i \sqrt{\hbar} \gamma \frac{\eta_1^2 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} F' \varphi_0 \quad (5.28)$$

$$- \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar \gamma \frac{\eta_1 c(a_1) B_1}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} F' \varphi_1 \quad (5.29)$$

$$\zeta_2(t, \hbar, x) = - \frac{\eta_1^2 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} \overline{c(x)} F \varphi_0 \quad (5.30)$$

$$- i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{\eta_1 B_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} \overline{c(x)} F \varphi_1 \quad (5.31)$$

$$+ i \sqrt{\hbar} \gamma \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} \overline{c(x)} F' \varphi_0 \quad (5.32)$$

$$\zeta_3(t, \hbar, x) = \begin{pmatrix} r_{11}(x) \\ r_{21}(x) \end{pmatrix} F \varphi_0 \quad (5.33)$$

$$\zeta_4(t, \hbar, x) = - \begin{pmatrix} r_{12}(x) \\ r_{22}(x) \end{pmatrix} \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} F \varphi_0. \quad (5.34)$$

Pour les termes (5.17), (5.18) and (5.26), on développe les quantités dépendant de x à un ordre plus élevé par la formule de Taylor (pour le tout premier et le dernier termes) :

$$\begin{aligned} & \eta_1 c(a_1) F \varphi_0 + \eta_1 c'(a_1) F(x - a_1) \varphi_0 + \eta_1 c^{[2]}(x, a_1) F \varphi_0, \\ & - \eta_1 c(a_1) F \varphi_0 - \eta_1 c(a_1) \frac{E_2'(a_1) - E_1'(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} F(x - a_1) \varphi_0 - \eta_1 c(a_1) \frac{(E_2 - E_1)^2(x, a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} F \varphi_0. \end{aligned}$$

Ainsi, à l'ordre dominant, les termes (5.17) et (5.26) se compensent et la contribution à l'ordre suivant provenant des termes (5.17), (5.18), (5.20), (5.21) et (5.26) est

$$\sqrt{\hbar}k(t)F\varphi_1 = \sqrt{\hbar}k(t)\varphi_1 - \sqrt{\hbar}k(t)(1-F)\varphi_1 \quad (5.35)$$

avec $k(t)$ une fonction périodique indépendante de \hbar à savoir

$$\begin{aligned} \sqrt{2}k(t) &= \eta_1(t)c'(a_1(t))A_1(t) + ic(a_1(t))B_1(t) \\ &\quad - \frac{\eta_1(t)c(a_1(t))}{E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t))} \left[\theta_1 + [E_2'(a_1(t)) - E_1'(a_1(t))] A_1(t) \right]. \end{aligned}$$

Comme d'habitude, le dernier terme de (5.35) s'avère être exponentiellement petit en \hbar , quant au premier, il conduit à une erreur d'ordre $O(\hbar^2)$ d'après le Corollaire 5.3.

(5.17), (5.18) et (5.22)-(5.26) comportent eux aussi des termes bornés par $\hbar F\varphi_l$ avec $l = 0, 2$ qui conduiront à une erreur d'ordre $O(\hbar^{7/4})$ en majorant brutalement (et même $O(\hbar^2)$ en procédant avec précision).

Finalement, comme déjà vu, tous les termes comportant des dérivées de la fonction de troncature F de (5.19) et (5.27)-(5.29) sont exponentiellement petit en \hbar si bien que, en situation sans croisement, l'erreur globale est $O(\hbar^{3/2})$ (de $\zeta_2(t, \hbar, x)$ à $\zeta_4(t, \hbar, x)$, l'erreur produite est d'ordre $O(\hbar^2)$).

Calculons maintenant la norme L^2 de notre quasimode :

$$\|\psi_\hbar\|^2 = \|\psi_0\|^2 + \hbar^2 \|\psi_1\|^2$$

et d'après le Théorème 5.1, on a

$$\|\psi_0\|^2 = \frac{2\sqrt{\pi}\tau_1(E_0)}{|\theta_1|} + O(\hbar^{1/2}).$$

D'après le Corollaire 5.3, on a aussi

$$\|\psi_1\|^2 = \frac{2\sqrt{\pi}}{|\theta_1|} \int_0^{\tau(E_0)} \frac{\eta_1(t)^2 c(a_1(t))^2}{[E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t))]^2} dt + O(\hbar^{1/2})$$

ce qui conclut. □

5.2.3 Retour à l'hamiltonien initial

On désigne par $\Phi_j(x) = U(x)e_j$ un choix de vecteur propre associé à $E_j(x)$ pour la matrice 2×2 $V(x)$.

Corollaire 5.5 *La fonction vectorielle*

$$\hbar^{-1/4} \sqrt{\frac{|\theta_1|}{2\sqrt{\pi}\tau_1(E_0)}} \int_0^{\tau_1(E_0)} \varphi_0(t, \hbar, \gamma, x) \left[\Phi_1(x) + i\hbar \frac{\langle \Phi_2(a_1(t)), \eta_1(t)\Phi_1'(a_1(t)) \rangle}{E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t))} \Phi_2(x) \right] dt$$

est un quasimode associé à la quasi-énergie E_1^\hbar pour l'opérateur H_\hbar .

Remarque 5.3 Autrement dit, le terme correctif dans le quasimode est essentiellement celui déjà introduit dans la formule (4.15).

5.3 Construction de quasimodes en situation de croisement générique

Passons maintenant à la situation de croisement : on se place encore dans la situation où \mathcal{H} est de dimension 2 et on suppose que $V(x)$ possède un *croisement de valeurs propres en* x_0 au sens où $V(x)$ possède deux valeurs propres distinctes pour $x \neq x_0$ et $V(x_0)$ est une matrice scalaire (si bien qu'elle possède une unique valeur propre double). On suppose enfin que le croisement en x_0 est *non dégénéré* (c'est le cas générique et on parlera de *croisement transverse*) au sens où la matrice $V'(x_0)$ n'est pas scalaire (autrement dit $\{V(x_0), V'(x_0)\}$ est une famille libre de matrices autoadjointes).

Dans cette situation, les valeurs propres $E_1(x)$ et $E_2(x)$ sont aussi régulières que $V(x)$ et on peut encore construire $U(x)$ de manière régulière en x (même en x_0) pour diagonaliser $V(x)$. On notera que ce n'est pas nécessairement possible (même si $V(x)$ est de classe \mathcal{C}^∞) en dimension 1 si le croisement n'est pas transverse (cf. [Kato76] II. §5 Exemple 5.3 p.111) et en dimension supérieure (cf. [Kato76] II. §7 Exemple 5.12 p.116-117).

On est donc ramené à construire des quasimodes pour l'hamiltonien (5.9) avec

$$E_c = E_1(x_0) = E_2(x_0), \quad E_1'(x_0) \neq E_2'(x_0)$$

et $E_1(x) \neq E_2(x)$ pour $x \neq x_0$.

Soit $E_0 \in \mathbb{R}$ vérifiant (E1)-(E2) avec $V(x) = E_1(x)$ et on suppose que x_0 appartient à la projection $[q_-, q_+]$ de $\gamma_1(E_0)$ sur l'axe des positions. Deux situations sont possibles (la situation $E_0 < E_c$ n'est pas possible et elle a déjà été mentionnée, donc traitée, dans le premier point des Remarques 5.2) :

1. $E_0 > E_c$: il s'agit de la situation générique (x_0 est dans l'intérieur de l'intervalle $[q_-, q_+]$) et il existe alors deux temps distincts $0 \leq t_1 < t_2 < \tau_1(E_0)$ tels que $a_1(t_j) = x_0$; on a $\eta_1(t_1) = -\eta_2(t_2) = \xi_0 \neq 0$ (les deux points de croisement sont symétriques par rapport à l'axe des positions dans l'espace des phases) et quitte à changer l'origine des temps, on supposera qu'on a $t_1 > 0$; on pose par ailleurs, pour $\Delta > 0$ assez petit

$$J(\Delta) = [0, t_1 - \Delta] \cup [t_1 + \Delta, t_2 - \Delta] \cup [t_2 + \Delta, \tau_1(E_0)],$$

$$K(\Delta) = [t_1 - \Delta, t_1 + \Delta] \cup [t_2 - \Delta, t_2 + \Delta] \quad ;$$

2. $E_0 = E_c$: il s'agit de la situation critique (x_0 est une des deux extrémités de l'intervalle $[q_-, q_+]$) et les deux temps du cas précédent coïncident en une même valeur t_0 ; on a $a_1(t_0) = x_0$, $\eta_1(t_0) = 0$ et quitte à changer l'origine des temps, on supposera qu'on a $0 < t_0 < \tau_1(E_0)$; on pose ici encore, pour $\Delta > 0$ assez petit

$$J(\Delta) = [0, t_0 - \Delta] \cup [t_0 + \Delta, \tau_1(E_0)],$$

$$K(\Delta) = [t_0 - \Delta, t_0 + \Delta].$$

Théorème 5.6 *Dans les deux situations décrites ci-dessus, avec les notations (5.10)-(5.15) et*

$$\psi_1(x) = -h^{-1/4} \int_{J(\sqrt{h})} \frac{\eta_1(t)c(a_1(t))}{E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t))} F\varphi_0(t, \hbar, \gamma, x) dt \quad (5.36)$$

au lieu de (5.16) et si de plus le couple (E_0, \hbar) vérifie la règle de Bohr-Sommerfeld pour le niveau $E_1(x)$

$$I_1(E_0) = S_1(\tau_1(E_0)) + E_0\tau_1(E_0) \in 2\pi\mathbb{N}\hbar,$$

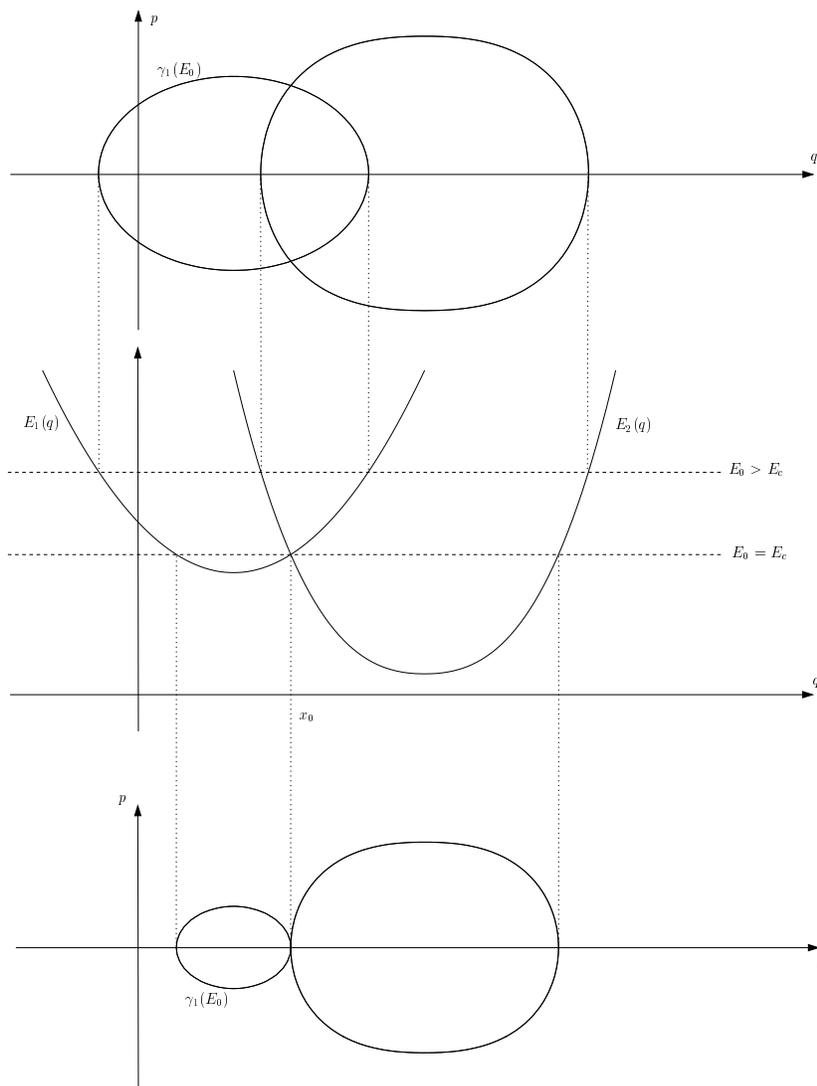


FIG. 5.3 – Trajectoires classiques dans l'espace des phases pour deux potentiels qui se croisent transversalement.

alors ψ^{\hbar} vérifie

$$\|\psi^{\hbar}\|^2 = \frac{2\sqrt{\pi}\tau_1(E_0)}{|\theta_1|} + O(\hbar^{1/2})$$

et

$$(\tilde{H}_{\hbar} - E_1^{\hbar})\psi^{\hbar} = O(\hbar^{5/4} \ln \hbar).$$

Remarques 5.4

1. Si $c(x_0) = 0$, on peut en fait utiliser (5.16) et le quasimode est alors d'ordre $3/2$.
2. Il n'est pas indispensable de faire le choix explicite $\Delta = \sqrt{\hbar}$ dans (5.36), mais les termes d'erreurs sont alors respectivement $O(\hbar^{1/2} + \hbar^{3/2}|\ln \Delta|^2)$ et $O(\hbar^2 + \hbar^{3/4}\Delta + \hbar^{5/4}|\ln \Delta|)$.

Preuve On reprend la stratégie de la preuve du Théorème 5.4. Les termes d'erreur à l'ordre dominant sont maintenant, en ignorant la contribution des dérivées de la fonction

de troncature F :

$$\begin{aligned} c(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_0}{\partial x} + (H_2 - E_1^\hbar) \psi_1 &= \hbar^{-1/4} \int_0^{\tau_1(E_0)} e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^\hbar)} \zeta_1^0(t, \hbar, x) dt \\ &+ \hbar^{-1/4} \int_{J(\Delta)} e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^\hbar)} \zeta_1^+(t, \hbar, x) dt \\ &+ \hbar^{-1/4} \int_{K(\Delta)} e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^\hbar)} \zeta_1^-(t, \hbar, x) dt \end{aligned}$$

où

$$\zeta_1^0(t, \hbar, x) = \eta_1(c(x) - c(a_1)) F \varphi_0 \quad (5.37)$$

$$+ i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} B_1 \eta_1 c(x) F \varphi_1 \quad (5.38)$$

$$\zeta_1^+(t, \hbar, x) = -\frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} (E_2(x) - E_2(a_1)) F \varphi_0 \quad (5.39)$$

$$- i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{B_1 \eta_1^2 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} F \varphi_1 \quad (5.40)$$

$$+ \hbar \frac{\eta_1 c(a_1)}{E_2(a_1) - E_1(a_1)} \left[\left(\frac{\pi}{\tau_1(E_0)} - \frac{1}{4} |B_1|^2 \right) F \varphi_0 + \frac{1}{4} B_1^2 \sqrt{2} F \varphi_2 \right] \quad (5.41)$$

$$\zeta_1^-(t, \hbar, x) = \eta_1 c(a_1) F \varphi_0. \quad (5.42)$$

- $\zeta_1^0(t, \hbar, x)$ est traité comme précédemment et donne une erreur d'ordre $O(\hbar^2)$;
- en procédant brutalement, $\zeta_1^-(t, \hbar, x)$ conduit à une erreur d'ordre $O(\hbar^{3/4} \Delta)$ (voire plus petite) :

$$\left\| \hbar^{-1/4} \int_{K(\Delta)} e^{\frac{i}{\hbar}(S_1(t) + tE_1^\hbar)} \zeta_1^-(t, \hbar, \cdot) dt \right\| \leq \hbar^{-1/4} \int_{K(\Delta)} \|\zeta_1^-(t, \hbar, \cdot)\| dt \leq C \hbar^{-1/4} \Delta ;$$

- enfin, $\zeta_1^+(t, \hbar, x)$ est traité avec plus d'attention : ce sont les deux premiers termes qui sont les plus singuliers et ils conduisent à une erreur d'ordre $O(\hbar^{5/4} |\ln \Delta|)$ (voire plus petite). Voyons comment traiter le second. En ignorant la contribution de la fonction de troncature F et à un facteur $\hbar^{3/2}$ près, il vaut :

$$-\frac{i}{\sqrt{2}} \hbar^{-1/4} \int_{J(\Delta)} \frac{B_1(t) \eta_1(t)^2 c(a_1(t))}{E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t))} \tilde{\varphi}_1(t, \hbar, x) dt, \quad (5.43)$$

comme précédemment cette quantité est bornée par

$$\frac{\hbar^{-1/4}}{\sqrt{2}} \int_{J(\Delta)} \left| \frac{B_1(t) \eta_1(t)^2 c(a_1(t))}{E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t))} \right| dt.$$

Intéressons nous maintenant au comportement de l'intégrande au bord de l'intervalle d'intégration dans le cas générique $E_0 > E_c$, on a :

$$B_1(t) = B_1(t_j) + O(t - t_j)$$

$$\eta_1(t) = (-1)^{j+1} \xi_0 + O(t - t_j)$$

$$c(a_1(t)) = c(x_0) + O(t - t_j)$$

$$E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t)) = (-1)^j (E_1'(x_0) - E_2'(x_0)) \xi_0 (t - t_j) + O((t - t_j)^2)$$

si bien que, dans la situation générique où $c(x_0) \neq 0$, l'intégrande se comporte comme

$$\left| \frac{B_1(t_j)\xi_0 c(x_0)}{E'_1(x_0) - E'_2(x_0)} \right| \frac{1}{|t - t_j|} + O(1)$$

et notre quantité est bornée, à une constante multiplicative près, par $\hbar^{-1/4} |\ln \Delta|$ comme annoncé.

La situation critique $E_0 = E_c$ est traitée *grosso modo* de la même façon sauf que, autour du temps de croisement t_0 , on a

$$\eta_1(t) = -E'_1(x_0)(t - t_0) + O((t - t_0)^2)$$

$$c(a_1(t)) = c(x_0) + O(t - t_0)$$

$$E_2(a_1(t)) - E_1(a_1(t)) = (E'_1(x_0) - E'_2(x_0)) \frac{E'_1(x_0)}{2} (t - t_0)^2 + O((t - t_0)^3)$$

si bien que, dans la situation générique où $c(x_0) \neq 0$ et puisque $E'_1(x_0) \neq 0$ (car $\gamma_1(E_0)$ est lisse au voisinage de $(x_0, 0)$), l'intégrande a pour asymptotique

$$2 \left| \frac{B_1(t_0)E'_1(x_0)c(x_0)}{E'_1(x_0) - E'_2(x_0)} \right| \frac{1}{|t - t_0|} + O(1)$$

et la situation est identique à celle du cas générique $E_0 > E_c$.

Quant aux termes $\zeta_k(t, x)$ pour $k = 2, 3, 4$, on montre facilement qu'ils produisent respectivement des erreurs d'ordre

- $O(\hbar^{7/4} |\ln \Delta|)$ pour $\zeta_2(t, \hbar, x)$;
- $O(\hbar^2)$ pour $\zeta_3(t, \hbar, x)$;
- $O(\hbar^{11/4} |\ln \Delta|)$ pour $\zeta_4(t, \hbar, x)$.

Calculons enfin la norme L^2 de ψ_1 pour s'assurer que notre quasimode est correctement normalisé. En procédant comme avec (5.43), on obtient que la norme de ψ_1 est bornée à une constante multiplicative près par $\hbar^{-1/4} |\ln \Delta|$ dans le cas générique $E_0 > E_c$ et $\hbar^{-1/4}$ dans le cas critique $E_0 = E_c$. \square

Bibliographie

- [Balazard85] A. Balazard-Konlein, Asymptotique semi-classique du spectre pour des opérateurs à symbole opératoire, *C. R. Acad. Sci. Paris* (1985), Sér. I, **301**, p 903.
- [Bily01] J-M. Bily, Propagation d'états cohérents et applications, Thèse de Doctorat, Université de Nantes 2001.
- [BornOppen27] M. Born, R. Oppenheimer, Zur Quantentheorie der Molekeln, *Ann. Phys. Leipzig* (1927), **84**, p 457.
- [Borowitz67] S. Borowitz, Fundamentals of quantum mechanics. Particles, waves, and wave mechanics, New York and Amsterdam : W.A. Benjamin, Inc. XIV, 1967.
- [Cole68] J. D. Cole, Perturbation methods in applied mathematics, Waltham, Mass., Toronto, London : Blaisdell 1968.
- [Colin02] Y. Colin de Verdière, The level crossing problem in semi-classical analysis I. The symmetric case, *Ann. Inst. Fourier* (2003), **53**, p 1023.
- [Colin03] Y. Colin de Verdière, The level crossing problem in semi-classical analysis II. The hermitian case, *Prépublication de l'Institut Fourier* (2003).
- [Colin04] Y. Colin de Verdière, Bohr-Sommerfeld phase for avoided crossings, preprint (mars 2004) <http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~ycolver/adia.ps>.
- [ColinParisse99] Y. Colin de Verdière, B. Parisse, Singular Bohr-Sommerfeld rules, *Commun. Math. Phys.* (1999), **205**, p 459.
- [ColinPinel03] Y. Colin de Verdière, D. Pinel, Bohr-Sommerfeld rules to all orders, preprint (juillet 2003) <http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~ycolver/ebk.ps>.
- [ColinPolLomb99] Y. Colin de Verdière, J. Pollet, M. Lombardi, The microlocal Landau-Zener formula, *Ann. Inst. H. Poincaré* (1999), **71**, p 95.
- [CombRobert97] M. Combescure, D. Robert, Semiclassical spreading of quantum wave packets and applications near unstable fixed points of the classical flow, *Asympt. Anal.* (1997), **14**, p 377.
- [Davies95] E. B. Davies, Spectral theory and differential operators, Cambridge : University Press 1995.
- [DimassiSjöstr99] M. Dimassi, J. Sjöstrand, Spectral asymptotics in the semi-classical limit, London Mathematical Society Lecture Notes Series 268, Cambridge : University Press 1999.
- [Dozias97] S. Dozias, Clustering for the spectrum of h -pseudodifferential operators with periodic flow on an energy surface, *J. Funct. Anal.* (1997), **145**, No.2, p 296.
- [Droniou01] J. Droniou, Intégration et espaces de Sobolev à valeurs vectorielles, Polycopié de l'École Doctorale de Maths-Info de Marseille (2001), <http://www-gm3.univ-mrs.fr/polys/gm3-02/index.html>.
- [Fermanian02] C. Fermanian Kammerer, Wigner measures and molecular propagation through generic energy level crossings, *Prépublication de l'Université de Cergy Pontoise* (2002), N. 16.
- [FermLasser03] C. Fermanian Kammerer, C. Lasser, Wigner measures and codimension two crossings, *J. Math. Phys.* (2003), **44**, p 507.
- [Hagedorn85] G. A. Hagedorn, Semi-classical quantum mechanics IV : large order asymptotics and more general states in more than one dimension, *Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A* (1985), **42**, p 363.

- [Hagedorn86] G. A. Hagedorn, High order corrections to the time-dependent Born-Oppenheimer approximation I : smooth potentials, *Ann. Math.* (1986), **124**, p 571. Erratum (1987), **126**, p 219.
- [Hagedorn88] G. A. Hagedorn, High order corrections to the time-dependent Born-Oppenheimer approximation II : diatomic coulomb systems, *Commun. Math. Phys.* (1988), **117**, p 387.
- [Hagedorn91] G. A. Hagedorn, Proof of the Landau-Zener formula in an adiabatic limit with small eigenvalue gaps, *Commun. Math. Phys.* (1991), **136**, p 433.
- [Hagedorn94] G. A. Hagedorn, Molecular propagation through electron energy level crossings, *Memoirs Amer. Math. Soc.* (1994), **111**, No. 536.
- [Hagedorn98] G. A. Hagedorn, Raising and lowering operators for semiclassical wave packets, *Ann. Phys.* (1998), **269**, p 77.
- [Hagedorn98'] G. A. Hagedorn, Classification and normal forms for avoided crossings, *J. Phys. A* (1998), **31**, p 369.
- [HagJoye98] G. A. Hagedorn, A. Joye, Landau-Zener transitions through small electronic eigenvalue gaps in the Born-Oppenheimer approximation, *Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A* (1998), **68**, p 85.
- [HagJoye99] G. A. Hagedorn, A. Joye, Semiclassical dynamics with exponentially small error estimates, *Commun. Math. Phys.* (1999), **207**, p 439.
- [HagJoye99'] G. A. Hagedorn, A. Joye, Molecular propagation through small avoided crossings of electron energy levels, *Rev. Math. Phys.* (1999), **11**, no. 1, p 41.
- [HagJoye00] G. A. Hagedorn, A. Joye, Exponentially accurate semiclassical dynamics : propagation, localization, Ehrenfest times, scattering and more general states, *Ann. Inst. H. Poincaré* (2000), **1**, p 837.
- [HagJoye01] G. A. Hagedorn, A. Joye, A time-dependent Born-Oppenheimer approximation with exponentially small error estimates, *Commun. Math. Phys.* (2001), **223**, p 583.
- [HagJoye02] G. A. Hagedorn, A. Joye, Elementary exponential error estimates for the adiabatic approximation, *J. Math. Anal. Appl.* (2002), **267**, p 235.
- [HagRob98] G. A. Hagedorn, S. L. Robinson, Bohr-Sommerfeld quantization rules in the semiclassical limit, *J. Phys. A : Math. and Gen.*, (1998), **31**, p 10113.
- [HagRob99] G. A. Hagedorn, S. L. Robinson, Approximate Rydberg states of the hydrogen atom that are concentrated near Kepler orbits, *Helv. Phys. Acta*, (1999), **72**, no. 5-6, p 316.
- [Helffer97] B. Helffer, *h*-pseudodifferential operators and applications : an introduction, *IMA Vol. Math. Appl.*, Quasiclassical methods, **95**, Springer Verlag (1997), p 1.
- [HelfferRobert84] B. Helffer, D. Robert, Puits de potentiel généralisés et asymptotique semi-classique, *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.* (1984), **41**, No.3, p 291.
- [Husemoller66] D. Husemoller, *Fibre bundles*, Springer Verlag 1966.
- [Jilcott00] S. Jilcott, Time-dependent perturbation and the Born-Oppenheimer approximation, PhD Thesis, Virginia Polytechnic Institute and State University 2000.
- [Joye94] A. Joye, Proof of the Landau-Zener formula, *Asympt. Anal.* (1994), **9**, p 209.
- [Kato50] T. Kato, On the adiabatic theorem of quantum mechanics, *Phys. Soc. Jap.* (1950), **5**, p 435.
- [Kato76] T. Kato, *Perturbation theory of linear operators*, Springer Verlag 1976.
- [Khuat-Duy96] D. Khuat-Duy, Formules de traces semi-classiques pour une énergie critique et construction de quasi-modes à l'aide d'états cohérents, Thèse de Doctorat, Université de Paris-Dauphine 1996.
- [KleinMartSeilWang92] M. Klein, A. Martinez, R. Seiler, X. P. Wang, On the Born-Oppenheimer expansion for polyatomic molecules, *Commun. Math. Phys.* (1992), **143**, p 607.
- [KolFomine74] A. Kolmogorov, S. Fomine, *Éléments de la théorie des fonctions et de l'analyse fonctionnelle*, Moscou : Éditions Mir 1974.
- [Mikusiński78] J. Mikusiński, *The Bochner integral*, New York, San Francisco : Academic Press 1978.

- [Nenciu93] G. Nenciu, Linear adiabatic theory. Exponential estimates, *Comm. Math. Phys.* (1993), **152**, No.3, p 479.
- [Paul97] T. Paul, Semi-classical methods with emphasis on coherent states, *IMA Vol. Math. Appl.*, Quasiclassical methods, **95**, Springer Verlag (1997), p 51.
- [PaulUribe93] T. Paul, A. Uribe, A construction of quasi-modes using coherent states, *Ann. Inst. H. Poincaré* (1993), **59**, p 357.
- [Pollet97] J. Pollet, Analyse semi-classique d'un système d'équations de Schrödinger couplées : formule de Landau-Zener, Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier-Grenoble I 1997.
- [Ralston76] J. V. Ralston, On the construction of quasimodes associated with stable periodic orbits, *Commun. Math. Phys.* (1976), **51**, p 219.
- [ReedSimonII75] M. Reed, B. Simon, Methods of modern mathematical physics, Vol II. Fourier analysis, Self-adjointness. New York : Academic Press 1975.
- [ReedSimonIV78] M. Reed, B. Simon, Methods of modern mathematical physics, Vol IV. Analysis of operators. New York : Academic Press 1978.
- [Rousse04] V. Rousse, Landau-Zener transitions for eigenvalue avoided crossings in the adiabatic and Born-Oppenheimer approximations, *Asympt. Anal.* (2004), **37**, p 293.
- [Teufel03] S. Teufel, Adiabatic perturbation theory in quantum dynamics, Lecture Notes in Mathematics, Springer 2003.
- [WhittWatson27] E. T. Whittaker & G. N. Watson, A Course in modern analysis, Cambridge : University Press 1927.
- [Yosida78] K. Yosida, Functional analysis, Fifth edition, Springer-Verlag 1978.

Annexe A

Preuves du Chapitre 3

A.1 Preuve du Lemme 3.6

1. Pour commencer, on traite le cas $M \in \mathbb{R}_+^*$ (i.e $d = 1$)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_{1/2\pi}(e^{-\pi M x^2})(\xi) &= \int_{\mathbb{R}} e^{-i2\pi x \xi} e^{-\pi M x^2} dx \\
 &= \int_{\mathbb{R}} e^{-i2\pi M^{-1/2} y \xi} e^{-\pi y^2} M^{-1/2} dy \\
 &= M^{-1/2} \mathcal{F}_{1/2\pi}(e^{-\pi y^2})(M^{-1/2} \xi),
 \end{aligned}$$

or on sait que $\mathcal{F}_{1/2\pi}(e^{-\pi x^2})(\xi) = e^{-\pi \xi^2}$, d'où

$$\mathcal{F}_{1/2\pi}(e^{-\pi M x^2})(\xi) = M^{-1/2} e^{-\pi M^{-1} \xi^2}. \quad (\text{A.1})$$

2. On traite ensuite le cas $M \in \mathbb{C}$ avec $\Re M > 0$ par prolongement analytique : les deux membres de (A.1) sont analytiques en M et coïncident sur la demi-droite réelle d'après le point précédent, ils sont donc égaux.
3. On traite enfin le cas général, M s'écrit $M = A + iB$ avec $A \in \text{Sym}_d^{++}(\mathbb{R})$ et $B \in \text{Sym}_d(\mathbb{R})$. A admet une unique racine carrée symétrique définie positive qu'on notera $A^{1/2}$, alors $A^{-1/2} M A^{-1/2} = I + i A^{-1/2} B A^{-1/2}$. $A^{-1/2} B A^{-1/2}$ est symétrique réelle, elle se diagonalise donc en base orthonormale, autrement dit on a

$$P^t A^{-1/2} M A^{-1/2} P = I + iD$$

où $P \in O_d(\mathbb{R})$ et $D \in \text{Diag}_d(\mathbb{R})$.

$$\begin{aligned}
& \mathcal{F}_{1/2\pi}(e^{-\pi\langle x, Mx \rangle})(\xi) \\
&= \int_{\mathbb{R}} e^{-i2\pi\langle x, \xi \rangle} e^{-\pi\langle x, Mx \rangle} dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} e^{-i2\pi\langle A^{-1/2}Py, \xi \rangle} e^{-\pi\langle y, (I+iD)y \rangle} |\det(A^{-1/2}P)| dy \\
&= (\det A)^{-1/2} \prod_{k=1}^d \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i2\pi y_k \langle e_k, P^t A^{-1/2} \xi \rangle} e^{-\pi(1+id_k)y_k^2} dy_k \\
&= (\det A)^{-1/2} \prod_{k=1}^d \mathcal{F}_{1/2\pi}\left(e^{-\pi(1+id_k)y^2}\right)\left(\langle e_k, P^t A^{-1/2} \xi \rangle\right) \\
&= (\det A)^{-1/2} \prod_{k=1}^d \left[(1+id_k)^{-1/2} e^{-\pi(1+id_k)^{-1} \langle e_k, P^t A^{-1/2} \xi \rangle^2} \right] \\
&= (\det A)^{-1/2} \left(\prod_{k=1}^d (1+id_k)^{-1/2} \right) e^{-\pi\langle \xi, M^{-1} \xi \rangle}.
\end{aligned}$$

Ce qui conclut en remarquant que

$$\prod_{k=1}^d (1+id_k) = \det(I+iD) = (\det A)^{-1} \det M.$$

□

A.2 Preuve de la Proposition 3.12

On rappelle qu'on définit les polynômes de Hermite (H_n) par

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$$

pour $n \in \mathbb{N}$ et qu'ils vérifient

$$H_{n+2}(X) = 2XH_{n+1}(X) - 2(n+1)H_n(X) \quad (\text{A.2})$$

$$H'_{n+1}(X) = 2(n+1)H_n(X) \quad (\text{A.3})$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Par convention, on posera $H_n(X) = 0$ pour $n \in (\mathbb{Z} - \mathbb{N})$ (ainsi (A.3) est valable pour tout $n \in \mathbb{Z}$ et (A.2) l'est pour tout $n \in \mathbb{Z} - \{-2\}$).

Lemme A.1 *Pour $m, n \in \mathbb{Z}$, $a, c \in \mathbb{R}$, $b, d \in \mathbb{C}$, $\alpha \in \mathbb{C}$ et $\rho \in \mathbb{C}$ tels que $\Re \rho > 0$, on pose*

$$I_{m,n}(a, b, c, d, \rho) = \int_{\mathbb{R}} H_m(ax+b)H_n(cx+d)e^{-\rho x^2} dx$$

$$I_{m,n}(a, b, c, d, \rho, \alpha) = \int_{\mathbb{R}} H_m(ax+b)H_n(cx+d)e^{-\rho x^2} e^{\alpha x} dx$$

$$\begin{aligned}
S_{m,n}(a, b, c, d, \rho) &= \sqrt{\frac{\pi}{\rho}} \sum_{k=0}^{\min(m,n)} k! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^k C_m^k \left(\frac{\rho-a^2}{\rho}\right)^{\frac{m-k}{2}} H_{m-k}\left(b\sqrt{\frac{\rho}{\rho-a^2}}\right) \\
&\quad \times C_n^k \left(\frac{\rho-c^2}{\rho}\right)^{\frac{n-k}{2}} H_{n-k}\left(d\sqrt{\frac{\rho}{\rho-c^2}}\right). \quad (\text{A.4})
\end{aligned}$$

Alors, on a, pour tout $(m, n) \in \mathbb{Z}^2$,

$$I_{m,n}(a, b, c, d, \rho) = S_{m,n}(a, b, c, d, \rho), \quad (\text{A.5})$$

$$I_{m,n}(a, b, c, d, \rho, \alpha) = \exp\left(\frac{\alpha^2}{4\rho}\right) S_{m,n}\left(a, b + \frac{a\alpha}{2\rho}, c, d + \frac{c\alpha}{2\rho}, \rho\right).$$

Remarques A.1

1. $S_{m,n}(a, b, c, d, \rho)$ est indépendant du choix des racines carrées complexes $\sqrt{\frac{\rho}{\rho-a^2}}$ et $\sqrt{\frac{\rho}{\rho-c^2}}$ puisque, comme H_n possède la parité de n , la quantité $\left(\frac{\rho-a^2}{\rho}\right)^{n/2} H_n\left(b\sqrt{\frac{\rho}{\rho-a^2}}\right)$ est définie de manière unique.
2. Si $\rho = a^2$ ou $\rho = c^2$, on définit $S_{m,n}(a, b, c, d, \rho)$ par prolongement par continuité en utilisant que

$$\left(\frac{\rho-a^2}{\rho}\right)^{n/2} H_n\left(b\sqrt{\frac{\rho}{\rho-a^2}}\right) \xrightarrow{\rho \rightarrow a^2} (2b)^n$$

et son analogue pour c .

3. Dans la définition de $S_{m,n}(a, b, c, d, \rho)$ la majoration de k est inutile compte tenu de la convention $H_n = 0$ pour $n < 0$.

Preuve Pour (A.5), on procède par récurrence sur $m+n$.

Pour $m+n=0$ i.e $m=n=0$, on a

$$I_{0,0}(a, b, c, d, \rho) = \int_{\mathbb{R}} e^{-\rho x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\rho}}$$

par un résultat classique sur les intégrales de gaussienne et

$$S_{0,0}(a, b, c, d, \rho) = \sqrt{\frac{\pi}{\rho}}$$

puisque la somme se réduit à un seul terme égal à 1, d'où l'égalité. D'ailleurs, on a aussi l'égalité si $m < 0$ ou $n < 0$ (les deux quantités sont toutes deux nulles).

Supposons l'égalité vraie pour tous les couples (m, n) tels que $m+n \leq l$ et soit (m', n') un couple tel que $m'+n' = l+1$, $m' \geq 0$ et $n' \geq 0$. L'un des deux entiers m' , n' est nécessairement non nul, disons n' (l'autre cas se traite de façon absolument identique puisque toutes les formules sont invariantes si on échange (m, a, b) et (n, c, d)) et posons $m = m'$, $n = n' - 1$. En utilisant (A.2), en intégrant par parties puis en utilisant (A.3), on a, en omettant les paramètres (a, b, c, d, ρ) ,

$$\begin{aligned} I_{m,n+1} &= \int_{\mathbb{R}} H_m(ax+b)[2(cx+d)H_n(cx+d) - 2nH_{n-1}(cx+d)]e^{-\rho x^2} dx \\ &= c \int_{\mathbb{R}} 2xH_m(ax+b)H_n(cx+d)e^{-\rho x^2} dx + 2dI_{m,n} - 2nI_{m,n-1} \\ &= \frac{c}{\rho} \int_{\mathbb{R}} [aH'_m(ax+b)H_n(cx+d) + cH_m(ax+b)H'_n(cx+d)] e^{-\rho x^2} dx \\ &\quad + 2dI_{m,n} - 2nI_{m,n-1} \\ &= 2n\frac{c^2}{\rho}I_{m,n-1} + m\frac{2ac}{\rho}I_{m-1,n} + 2dI_{m,n} - 2nI_{m,n-1} \\ &= 2dI_{m,n} - 2n\frac{\rho-c^2}{\rho}I_{m,n-1} + m\frac{2ac}{\rho}I_{m-1,n}. \end{aligned}$$

Par ailleurs, en utilisant (A.2) et les identités

$$C_{n+1}^k = \left(1 + \frac{k}{n+1-k}\right) C_n^k, \quad (n-k)C_{n+1}^k = n \left(1 + \frac{k}{n+1-k}\right) C_{n-1}^k,$$

$$kC_m^k = mC_{m-1}^{k-1}, \quad \frac{k}{n+1-k}C_n^k = C_n^{k-1}, \quad \frac{k}{n+1-k}nC_{n-1}^k = [(n-1) - (k-1)]C_n^{k-1},$$

on a, en posant $\rho_a = \sqrt{\frac{\rho}{\rho-a^2}}$ et $\rho_c = \sqrt{\frac{\rho}{\rho-c^2}}$,

$$\begin{aligned} & S_{m,n+1} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\rho}}(n+1)! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^{n+1} C_m^{n+1} \rho_a^{-(m-n-1)} H_{m-n-1}(b\rho_a) \\ &+ \sqrt{\frac{\pi}{\rho}} \sum_{k=0}^{\min(m,n)} k! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^k C_m^k \rho_a^{-(m-k)} H_{m-k}(b\rho_a) \\ &\times C_{n+1}^k \rho_c^{-(n+1-k)} [2d\rho_c H_{n-k}(d\rho_c) - 2(n-k)H_{n-1-k}(d\rho_c)] \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\rho}} n! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^{n+1} (n+1) C_m^{n+1} \rho_a^{-(m-n-1)} H_{m-n-1}(b\rho_a) \\ &+ \sqrt{\frac{\pi}{\rho}} \sum_{k=0}^{\min(m,n)} k! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^k C_m^k \rho_a^{-(m-k)} H_{m-k}(b\rho_a) \left(1 + \frac{k}{n+1-k}\right) \\ &\times [2dC_n^k \rho_c^{-(n-k)} H_{n-k}(d\rho_c) - 2nC_{n-1}^k \rho_c^{-[(n-1)-k+2]} H_{n-1-k}(d\rho_c)] \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\rho}}(n+1)! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^{n+1} C_m^{n+1} \rho_a^{-(m-n-1)} H_{m-n-1}(b\rho_a) + 2dS_{m,n} - 2n\rho_c^{-2}S_{m,n-1} \\ &+ \frac{2ac}{\rho} \sqrt{\frac{\pi}{\rho}} \sum_{k=1}^{\min(m,n)} (k-1)! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^{k-1} k C_m^k \rho_a^{-[(m-1)-(k-1)]} H_{(m-1)-(k-1)}(b\rho_a) \\ &\times \frac{k}{n+1-k} \rho_c^{-[n-(k-1)]} [2d\rho_c C_n^k H_{(n-1)-(k-1)}(d\rho_c) - 2nC_{n-1}^k H_{(n-2)-(k-1)}(d\rho_c)] \\ &= 2dS_{m,n} - 2n\rho_c^{-2}S_{m,n-1} + m \frac{2ac}{\rho} \sqrt{\frac{\pi}{\rho}} n! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^n C_{m-1}^n \rho_a^{[(m-1)-n]} H_{(m-1)-n}(b\rho_a) \\ &+ m \frac{2ac}{\rho} \sqrt{\frac{\pi}{\rho}} \sum_{k=0}^{\min(m-1,n-1)} k! \left(\frac{2ac}{\rho}\right)^k C_{m-1}^k \rho_a^{-[(m-1)-k]} H_{(m-1)-k}(b\rho_a) \\ &\times C_n^k \rho_c^{-(n-k)} [2d\rho_c H_{(n-1)-k}(d\rho_c) - 2[(n-1)-k]H_{(n-2)-k}(d\rho_c)] \\ &= 2dS_{m,n} - 2n\rho_c^{-2}S_{m,n-1} + m \frac{2ac}{\rho} S_{m-1,n}. \end{aligned}$$

D'où l'égalité (A.5) pour le couple (m', n') , ce qui conclut la preuve par récurrence.

Par ailleurs, si $\alpha \in \rho\mathbb{R}$, on a

$$\begin{aligned} I_{m,n}(a, b, c, d, \rho, \alpha) &= \exp\left(\frac{\alpha^2}{4\rho}\right) \int_{\mathbb{R}} H_m(ax+b) H_n(cx+d) e^{-\rho(x-\frac{\alpha}{2\rho})^2} dx \\ &= \exp\left(\frac{\alpha^2}{4\rho}\right) \int_{\mathbb{R}} H_m\left(ay+b+\frac{a\alpha}{2\rho}\right) H_n\left(cy+d+\frac{c\alpha}{2\rho}\right) e^{-\rho y^2} dy \\ &= \exp\left(\frac{\alpha^2}{4\rho}\right) I_{m,n}\left(a, b+\frac{a\alpha}{2\rho}, c, d+\frac{c\alpha}{2\rho}, \rho\right), \end{aligned}$$

d'où

$$I_{m,n}(a, b, c, d, \rho, \alpha) = \exp\left(\frac{\alpha^2}{4\rho}\right) S_{m,n}\left(a, b + \frac{a\alpha}{2\rho}, c, d + \frac{c\alpha}{2\rho}, \rho\right).$$

Les deux membres de l'égalité précédente sont holomorphes en α et coïncident pour $\alpha \in \rho\mathbb{R}$ donc ils sont toujours égaux. \square

Passons maintenant à la preuve de la proposition. On va d'abord faire un certain nombre de manipulations (décrite par la Figure A.1) pour se ramener au cas $a_1 = a_2 = 0$ et $\eta_1 = -\eta_2$.

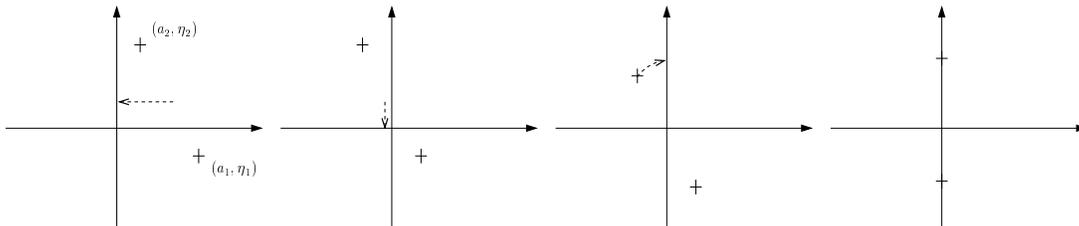


FIG. A.1 – Manipulations successives pour se ramener à un cas “simple”.

On a

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_l(A_1, B_1, \hbar, a_1, \eta_1, \cdot), \varphi_k(A_2, B_2, \hbar, a_2, \eta_2, \cdot) \rangle \\ &= \left\langle \tau^{-\frac{a_1+a_2}{2}} \varphi_l(A_1, B_1, \hbar, a_1, \eta_1, \cdot), \tau^{-\frac{a_1+a_2}{2}} \varphi_k(A_2, B_2, \hbar, a_2, \eta_2, \cdot) \right\rangle \\ &= \left\langle \varphi_l\left(A_1, B_1, \hbar, \frac{a_1-a_2}{2}, \eta_1, \cdot\right), \varphi_k\left(A_2, B_2, \hbar, \frac{a_2-a_1}{2}, \eta_2, \cdot\right) \right\rangle \\ &= \left\langle \mu^{-\frac{\eta_1+\eta_2}{2\hbar}} \varphi_l\left(A_1, B_1, \hbar, \frac{a_1-a_2}{2}, \eta_1, \cdot\right), \mu^{-\frac{\eta_1+\eta_2}{2\hbar}} \varphi_k\left(A_2, B_2, \hbar, \frac{a_2-a_1}{2}, \eta_2, \cdot\right) \right\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \langle \eta_1 + \eta_2, a_2 - a_1 \rangle} \langle \varphi_l(A_1, B_1, \hbar, -a_0, -\eta_0, \cdot), \varphi_k(A_2, B_2, \hbar, a_0, \eta_0, \cdot) \rangle \end{aligned}$$

où on a posé

$$a_0 = \frac{a_2 - a_1}{2}, \quad \eta_0 = \frac{\eta_2 - \eta_1}{2}.$$

On note $U(t)$ le propagateur (unitaire) associé à l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique d -dimensionnel

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta_x + \frac{x^2}{2} \right) \psi$$

qui nous est donné par le Corollaire 3.17 et on note t_0 un réel tel que $(a_0 + i\eta_0)e^{-it_0}$ soit imaginaire pur : on peut par exemple choisir t_0 tel que

$$\cos t_0 = \frac{\eta_0}{\sqrt{a_0^2 + \eta_0^2}}, \quad \sin t_0 = -\frac{a_0}{\sqrt{a_0^2 + \eta_0^2}}.$$

On a alors

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_l(A_1, B_1, \hbar, -a_0, -\eta_0, \cdot), \varphi_k(A_2, B_2, \hbar, a_0, \eta_0, \cdot) \rangle \\ &= \langle U(t_0) \varphi_l(A_1, B_1, \hbar, -a_0, -\eta_0, \cdot), U(t_0) \varphi_k(A_2, B_2, \hbar, a_0, \eta_0, \cdot) \rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} (S_2(t_0) - S_1(t_0))} \langle \varphi_l(A_1(t_0), B_1(t_0), \hbar, 0, -\eta(t_0), \cdot), \varphi_k(A_2(t_0), B_2(t_0), \hbar, 0, \eta(t_0), \cdot) \rangle \end{aligned}$$

avec

$$A_j(t_0) = \frac{\eta_0 A_j - ia_0 B_j}{\sqrt{a_0^2 + \eta_0^2}}, \quad B_j(t_0) = \frac{\eta_0 B_j - ia_0 A_j}{\sqrt{a_0^2 + \eta_0^2}},$$

$$\eta(t_0) = \sqrt{a_0^2 + \eta_0^2}, \quad S_2(t_0) - S_1(t_0) = 0.$$

Posons maintenant $\underline{A}_j = A_j(t_0)$, $\underline{B}_j = B_j(t_0)$ et $\eta = \eta(t_0)$, si bien qu'on doit calculer

$$Q = \langle \varphi_l(\underline{A}_1, \underline{B}_1, \hbar, 0, -\eta, \cdot), \varphi_k(\underline{A}_2, \underline{B}_2, \hbar, 0, \eta, \cdot) \rangle$$

qui vaut, d'après la Proposition 3.9 et le deuxième point des Remarques 3.6,

$$\frac{(\pi\hbar)^{-1/2} \overline{\underline{A}_1}^{-1/2} \left(\frac{\underline{A}_1}{|\underline{A}_1|} \right)^l \underline{A}_2^{-1/2} \left(\frac{\overline{\underline{A}_2}}{|\underline{A}_2|} \right)^k}{\sqrt{2^{l+k} l! k!}}$$

$$\times \int_{\mathbb{R}} H_l \left(|\underline{A}_1|^{-1} \frac{x}{\sqrt{\hbar}} \right) H_k \left(|\underline{A}_2|^{-1} \frac{x}{\sqrt{\hbar}} \right) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \frac{\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}}{2} x^2 + 2 \frac{i}{\hbar} \eta x \right) dx.$$

D'où, en appliquant le Lemme A.1 avec

$$a = \frac{|\underline{A}_1|^{-1}}{\sqrt{\hbar}}, \quad b = 0, \quad c = \frac{|\underline{A}_2|^{-1}}{\sqrt{\hbar}}, \quad d = 0, \quad \rho = \frac{\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}}{2\hbar}, \quad \alpha = i \frac{2\eta}{\hbar},$$

$$Q = \frac{(\pi\hbar)^{-1/2} \overline{\underline{A}_1}^{-1/2} \left(\frac{\underline{A}_1}{|\underline{A}_1|} \right)^l \underline{A}_2^{-1/2} \left(\frac{\overline{\underline{A}_2}}{|\underline{A}_2|} \right)^k \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \frac{2\eta^2}{\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}} \right)}{\sqrt{2^{l+k} l! k!}}$$

$$\times S_{l,k} \left(a, 2i \frac{|\underline{A}_1|^{-1} \eta}{\sqrt{\hbar} [\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}]}, c, 2i \frac{|\underline{A}_2|^{-1} \eta}{\sqrt{\hbar} [\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}]}, \rho \right).$$

Ainsi, si on pose

$$\underline{b} = 2i \frac{|\underline{A}_1|^{-1} \eta}{\sqrt{\hbar} [\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}]}, \quad \underline{d} = 2i \frac{|\underline{A}_2|^{-1} \eta}{\sqrt{\hbar} [\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}]},$$

on a

$$\langle \varphi_l(A_1, B_1, \hbar, a_1, \eta_1, \cdot), \varphi_k(A_2, B_2, \hbar, a_2, \eta_2, \cdot) \rangle$$

$$= \frac{(\pi\hbar)^{-1/2} \overline{\underline{A}_1}^{-1/2} \left(\frac{\underline{A}_1}{|\underline{A}_1|} \right)^l \underline{A}_2^{-1/2} \left(\frac{\overline{\underline{A}_2}}{|\underline{A}_2|} \right)^k S_{l,k}(a, \underline{b}, c, \underline{d}, \rho)}{\sqrt{2^{l+k} l! k!}}$$

$$\times \exp \left(-\frac{1}{2\hbar} \frac{4\eta^2}{\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}} - \frac{i}{2\hbar} (\eta_1 + \eta_2)(a_2 - a_1) \right).$$

Or on a

$$\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_2} + \overline{\underline{A}_1 \underline{B}_2} = \overline{\underline{B}_1 \underline{A}_2} + \overline{\underline{A}_1 \underline{B}_2}, \quad \underline{A}_1 \underline{B}_2 - \underline{B}_1 \underline{A}_2 = A_1 B_2 - B_1 A_2,$$

$$\frac{4\eta^2}{\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_1^{-1}} + \underline{B}_2 \underline{A}_2^{-1}} = \frac{(2i\eta \overline{\underline{A}_1})(-2i\eta \underline{A}_2)}{\overline{\underline{B}_1 \underline{A}_2} + \overline{\underline{A}_1 \underline{B}_2}},$$

$$2i\eta \overline{\underline{A}_1} = \overline{\underline{B}_1}(a_1 - a_2) - i\overline{\underline{A}_1}(\eta_1 - \eta_2), \quad -2i\eta \underline{A}_2 = \underline{B}_2(a_1 - a_2) + i\underline{A}_2(\eta_1 - \eta_2),$$

$$\rho = \frac{\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2}{2\hbar\overline{A_1}A_2}, \quad \frac{2ac}{\rho} = \frac{\overline{A_1}}{|\overline{A_1}|} \frac{A_2}{|A_2|} \frac{4}{\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2},$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho - a^2}{\rho}\right)^{1/2} &= \left(\frac{(\overline{B_1}A_1 - 2)\overline{A_1}^{-1}A_2 + \overline{A_1}B_2}{\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2}\right)^{1/2} = \left(\frac{\overline{A_1}A_1B_2 - \overline{B_1}A_2}{\overline{A_1}B_1A_2 + \overline{A_1}B_2}\right)^{1/2} \\ &= \frac{\overline{A_1}}{|\overline{A_1}|} (A_1B_2 - B_1A_2)^{1/2} (\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2)^{-1/2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \underline{b}\sqrt{\frac{\rho}{\rho - a^2}} &= \hbar^{-1/2} 2i\eta\overline{A_2} (A_1B_2 - B_1A_2)^{-1/2} (\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2)^{-1/2} \\ &= -\hbar^{-1/2} \frac{B_2(a_1 - a_2) + iA_2(\eta_1 - \eta_2)}{\sqrt{A_1B_2 - B_1A_2}\sqrt{\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2}}, \end{aligned}$$

$$\left(\frac{\rho - c^2}{\rho}\right)^{1/2} = \frac{A_2}{|\overline{A_2}|} (\overline{B_1}A_2 - \overline{A_1}B_2)^{1/2} (\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2)^{-1/2},$$

$$\underline{d}\sqrt{\frac{\rho}{\rho - c^2}} = \hbar^{-1/2} \frac{\overline{B_1}(a_1 - a_2) - i\overline{A_1}(\eta_1 - \eta_2)}{\sqrt{\overline{B_1}A_2 - \overline{A_1}B_2}\sqrt{\overline{B_1}A_2 + \overline{A_1}B_2}}$$

ce qui conclut par substitution dans (A.4). \square

A.3 Preuve de la Proposition 3.15

Tout d'abord, on a

$$\begin{aligned} M_n^\gamma(0, A, B)^2 &= \|(1 - F)^{(n)}\psi_0\|^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} (1 - F)^{(n)}(\gamma\|y\|)^2 \pi^{-d/2} |\det A|^{-1} e^{-\|A|^{-1}y\|^2} dy \\ &\leq \int_{\|y\| \geq \gamma^{-1}} M_n^2 \pi^{-d/2} |\det A|^{-1} e^{-\|A|^{-1}y\|^2} dy \\ &= M_n^2 \pi^{-d/2} \int_{\|A|z\| \geq \gamma^{-1}} e^{-\|z\|^2} dz \\ &\leq M_n^2 \pi^{-d/2} \int_{\|z\| \geq \|A\|^{-1}\gamma^{-1}} e^{-\|z\|^2} dz \\ &= M_n^2 \pi^{-d/2} \left(2 \int_{r \geq \|A\|^{-1}\gamma^{-1}} e^{-r^2} dr \right)^d \\ &\leq M_n^2 \pi^{-d/2} 2^d \left(\int_{\|A\|^{-1}\gamma^{-1}}^{+\infty} e^{-\|A\|^{-1}\gamma^{-1}r} dr \right)^d \\ &= M_n^2 \pi^{-d/2} 2^d \|A\|^d \gamma^d e^{-d\|A\|^{-2}\gamma^{-2}}. \end{aligned} \tag{A.6}$$

Par ailleurs, en omettant un certain nombre de paramètres,

$$\begin{aligned}
& \|(1-F)^{(n)}\psi_{l+1_j}\|^2 \\
&= \frac{1}{l_j+1} \left\langle (1-F)^{(n)}\mathcal{A}_j^*\psi_l, (1-F)^{(n)}\mathcal{A}_j^*\psi_l \right\rangle \\
&= \frac{1}{l_j+1} \left\langle \left([(1-F)^{(n)}, \mathcal{A}_j^*] + \mathcal{A}_j^*(1-F)^{(n)} \right) \psi_l, (1-F)^{(n)}\mathcal{A}_j^*\psi_l \right\rangle \\
&= \frac{1}{l_j+1} \left(\left\langle [(1-F)^{(n)}, \mathcal{A}_j^*]\psi_l, (1-F)^{(n)}\sqrt{l_j+1}\psi_{l+1_j} \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + \left\langle (1-F)^{(n)}\psi_l, \mathcal{A}_j(1-F)^{(n)}\mathcal{A}_j^*\psi_l \right\rangle \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}} \left\langle [(1-F)^{(n)}, \mathcal{A}_j^*]\psi_l, (1-F)^{(n)}\psi_{l+1_j} \right\rangle \\
&\quad + \frac{1}{l_j+1} \left\langle (1-F)^{(n)}\psi_l, \left([\mathcal{A}_j, (1-F)^{(n)}] + (1-F)^{(n)}\mathcal{A}_j \right) \mathcal{A}_j^*\psi_l \right\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}} \left\langle [(1-F)^{(n)}, \mathcal{A}_j^*]\psi_l, (1-F)^{(n)}\psi_{l+1_j} \right\rangle \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{l_j+1}} \left\langle (1-F)^{(n)}\psi_l, [\mathcal{A}_j, (1-F)^{(n)}]\psi_{l+1_j} \right\rangle + \left\langle (1-F)^{(n)}\psi_l, (1-F)^{(n)}\psi_l \right\rangle \\
&= \|(1-F)^{(n)}\psi_l\|^2 + \frac{\sqrt{2}\gamma}{\sqrt{l_j+1}} \left\langle \left\langle Ae_j, \frac{y}{\|y\|} \right\rangle (1-F)^{(n+1)}\psi_l, (1-F)^{(n)}\psi_{l+1_j} \right\rangle \\
&\leq \|(1-F)^{(n)}\psi_l\|^2 + \frac{\sqrt{2}\gamma\|A\|}{\sqrt{l_j+1}} \|(1-F)^{(n+1)}\psi_l\| \cdot \|(1-F)^{(n)}\psi_{l+1_j}\|,
\end{aligned}$$

donc

$$M_n^\gamma(k+1, A, B)^2 \leq M_n^\gamma(k, A, B)^2 + \sqrt{2}\gamma\|A\|M_{n+1}^\gamma(k, A, B)M_n^\gamma(k+1, A, B),$$

puis

$$M_n^\gamma(k+1, A, B) \leq M_n^\gamma(k, A, B) + \sqrt{2}\gamma\|A\|M_{n+1}^\gamma(k, A, B).$$

Par une récurrence triviale, on a alors

$$M_n^\gamma(k, A, B) \leq \sum_{j=0}^k C_k^j (\sqrt{2}\gamma\|A\|)^j M_{n+j}^\gamma(0, A, B),$$

d'où (3.22) en utilisant (A.6).

Par ailleurs, on a

$$\frac{\partial}{\partial y_j}\psi_l = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=1}^d \left[\langle e_j, Be_k \rangle \sqrt{l_k+1}\psi_{l+1_k} - \langle Be_k, e_j \rangle \sqrt{l_k}\psi_{l-1_k} \right]$$

d'où (3.23).

Enfin, explicitons notre choix de F : on pose

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 1 \text{ ou } x \geq 2 \\ \exp\left(-\frac{1}{(x-1)(2-x)}\right) & \text{sinon} \end{cases}$$

et on définit alors F par $F(x) = 1 - C \int_0^x f(t)dt$ où $C^{-1} = \int_1^2 f(t)dt$.

Par construction même, on a $M_0 = 1$ et pour $n \geq 0$

$$M_{n+1} = C \sup_{x \in]1,2[} |f^{(n)}(x)|.$$

Or, on a

$$f^{(n)}(x) = \frac{P_n(x)}{(x-1)^n(2-x)^n} f(x)$$

où P_n est une famille de polynômes qui est uniquement déterminée par la relation de récurrence suivante

$$\begin{aligned} P_0 &= 1 \\ P_{n+1} &= (X-1)^2(2-X)^2 P_n' - 2n(3-2X)(X-1)(2-X)P_n + (3-2X)P_n. \end{aligned}$$

D'une part, on a

$$\sup_{x \in]1,2[} \left| \frac{f(x)}{(x-1)^n(2-x)^n} \right| = \sup_{y \in [4,+\infty[} |y^n e^{-y}| \leq \sup_{y \in [0,+\infty[} |y^n e^{-y}| = \left(\frac{n}{e}\right)^n$$

et d'autre part, si on pose $Q_n(X) = P_n\left(\frac{X+3}{2}\right)$, on a

$$\begin{aligned} Q_0 &= 1 \\ Q_{n+1} &= \left(\frac{X^4}{8} - \frac{X^2}{4} + \frac{1}{8}\right) Q_n' + \frac{n-2}{2} Q_n - \frac{n}{2} X^3 Q_n. \end{aligned}$$

et

$$\sup_{x \in [1,2]} |P_n(x)| = \sup_{x \in [-1,1]} |Q_n(x)|.$$

On voit facilement alors que pour $n > 0$, Q_n est de degré $3n - 2$ et que, si on désigne par c_n le maximum des modules des coefficients de Q_n , on a

$$c_{n+1} \leq \left(\frac{1}{8} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8}\right) (\deg Q_n) c_n + \frac{n+2}{2} c_n + \frac{n}{2} c_n \leq 3n c_n.$$

Ainsi

$$\sup_{x \in [-1,1]} |Q_n(x)| \leq (\deg Q_n + 1) c_n \leq 3^n n!$$

d'où l'estimation (3.24). □

A.4 Preuve du Théorème 3.16

On énonce d'abord les lemmes suivants dont on aura besoin dans la preuve du théorème.

Lemme A.2 *On a, pour $A, B \in GL_d(\mathbb{C})$ et $A', B' \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$,*

$$\begin{aligned} D_B \psi_0(A, B, y)(B') &= -\frac{1}{2}(y, B' A^{-1} y) \psi_0(A, B, y), \\ D_A \psi_0(A, B, y)(A') &= \frac{1}{2}(\nabla_y, A' B^{-1} \nabla_y) \psi_0(A, B, y) \\ &\quad + (A^{-1} y, \frac{A' B - B' A}{2} A^{-1} A' A^{-1} y) \psi_0(A, B, y). \end{aligned}$$

Preuve

1. La première égalité s'obtient facilement par dérivation de fonctions composées

$$\begin{aligned} D_B \psi_0(A, B, y)(B') &= -\frac{1}{2} D_B ((y, BA^{-1}y)) (B') \psi_0(A, B, y) \\ &= -\frac{1}{2} (y, B'A^{-1}y) \psi_0(A, B, y). \end{aligned}$$

2. La seconde s'obtient de manière analogue même si le calcul est sensiblement plus long

$$\begin{aligned} D_A \psi_0(A, B, y)(A') &= -\frac{1}{2} [(\det A)^{-1} D_A(\det A)(A') + (y, BD_A(A^{-1})(A')y)] \psi_0(A, B, y) \end{aligned}$$

or, on a

$$\begin{aligned} D_A(A^{-1})(A') &= -A^{-1}A'A^{-1} \\ D_A(\det A)(A') &= \text{Tr}(A'(\text{Com}A)^t) \end{aligned}$$

d'où

$$D_A \psi_0(A, B, y)(A') = -\frac{1}{2} [\text{Tr}(A'A^{-1}) - (y, BA^{-1}A'A^{-1}y)] \psi_0(A, B, y)$$

et d'autre part, on a

$$\begin{aligned} (\nabla_y, A'B^{-1}\nabla_y) \psi_0(A, B, y) &= -(\nabla_y, A'A^{-1}y) \psi_0(A, B, y) \\ &= -[(A'A^{-1}y, \nabla_y) + \text{Tr}(A'A^{-1})] \psi_0(A, B, y) \\ &= [(A'A^{-1}y, BA^{-1}y) - \text{Tr}(A'A^{-1})] \psi_0(A, B, y) \end{aligned}$$

ce qui conclut la preuve. □

Lemme A.3 Si $M \in \text{Sym}_d(\mathbb{C}) \cap GL_d(\mathbb{C})$ et $\beta \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$, on a

$$H[\beta M^{-1}, \beta, \beta^t M, 0, 0, 0](y, \nabla_y, s) \left(\exp \left[-\frac{(y, My)}{2} \right] \right) = 0.$$

Preuve On a

$$\nabla_y \left(\exp \left[-\frac{(y, My)}{2} \right] \right) = -My \left(\exp \left[-\frac{(y, My)}{2} \right] \right)$$

d'où

$$\begin{aligned} (\nabla_y, \beta M^{-1}\nabla_y) \left(\exp \left[-\frac{(y, My)}{2} \right] \right) &= -(\nabla_y, \beta y) \left(\exp \left[-\frac{(y, My)}{2} \right] \right) \\ (\beta y, \nabla_y) \left(\exp \left[-\frac{(y, My)}{2} \right] \right) &= -(\beta y, My) \left(\exp \left[-\frac{(y, My)}{2} \right] \right) \end{aligned}$$

et le résultat. □

Lemme A.4 Si pour $v \in \mathbb{C}^d$, on pose

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_v^*(t) &= \mathcal{A}(A(t), B(t), \hbar, a(t), \eta(t), v)^* \\ H(t) &= H[\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \mu, \nu](x, p_{\hbar, x}, t),\end{aligned}$$

alors on a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{A}_v^*(t) = [H(t), \mathcal{A}_v^*(t)].$$

Preuve On observe tout d'abord qu'on a, pour $v \in \mathbb{C}^d$,

$$\begin{aligned}[(p_{\hbar, x}, \alpha p_{\hbar, x}), \langle v, x \rangle] &= -2i\hbar \langle v, \alpha p_{\hbar, x} \rangle \\ [(p_{\hbar, x}, \beta x) + (\beta x, p_{\hbar, x}), \langle v, x \rangle] &= -2i\hbar \langle v, \beta x \rangle \\ [(x, \gamma x), \langle v, p_{\hbar, x} \rangle] &= -2 \langle v, \gamma x \rangle \\ [(p_{\hbar, x}, \beta x) + (\beta x, p_{\hbar, x}), \langle v, p_{\hbar, x} \rangle] &= -2 \langle v, \beta^t p_{\hbar, x} \rangle,\end{aligned}$$

en particulier, on a

$$\begin{aligned}[H(t), \langle v, x \rangle] &= -i\hbar \langle v, \beta x + \alpha p_{\hbar, x} + \lambda \rangle \\ [H(t), \langle v, p_{\hbar, x} \rangle] &= -i\hbar \langle v, -\gamma x - \beta^t p_{\hbar, x} - \mu \rangle,\end{aligned}$$

et finalement

$$[H(t), \mathcal{A}_v^*(t)] = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left(\langle (i\gamma A - \beta^t B)\bar{v}, x \rangle - i\langle (\beta A + i\alpha B)\bar{v}, p_{\hbar, x} \rangle - \langle \bar{v}, B^t \lambda - iA^t \mu \rangle \right).$$

D'autre part,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{A}_v^*(t) = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left(\langle \dot{B}\bar{v}, x \rangle - i\langle \dot{A}\bar{v}, p_{\hbar, x} \rangle - \langle \bar{v}, \dot{B}^* a + B^* \dot{a} - i\dot{A}^* \eta - iA^* \dot{\eta} \rangle \right)$$

d'où le résultat en utilisant (3.27). \square

Passons maintenant à la preuve du Théorème 3.16. On commence par l'établir pour $|l| = 0$ puis on utilisera le lemme précédent pour conclure par récurrence sur $|l|$.

1. On observe tout d'abord qu'on a

$$\psi_{\hbar, 0}(t, x) = \hbar^{-d/4} e^{\frac{i}{\hbar} S(t) + \frac{i}{\hbar} (\eta(t), x - a(t))} \psi_0 \left(A(t), B(t), \frac{x - a(t)}{\sqrt{\hbar}} \right).$$

On effectue alors le changement de variable

$$s = t, \quad y = \frac{x - a(t)}{\sqrt{\hbar}}.$$

Ainsi, les opérateurs $H[\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \mu, \nu](x, p_{\hbar, x}, t)$ et $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ deviennent respectivement

$$H \left[\hbar\alpha, \hbar\beta, \hbar\gamma, \sqrt{\hbar}(\beta a + \lambda), \sqrt{\hbar}(\gamma a + \mu), \nu + (\mu, a) + \frac{1}{2}(a, \gamma a) \right] (y, p_{1, y}, s)$$

et

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} + (\sqrt{\hbar} \dot{a}, p_{1, y}).$$

D'où, si on conjugue l'équation (3.26) par $e^{\frac{i}{\hbar} (S + (\eta, x - a))}$ et si on utilise les variables s et y ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \varphi_{\hbar, 0}(s, y) = H[\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}, \hat{\lambda}, \hat{\mu}, \hat{\nu}](y, p_{1, y}, s) \varphi_{\hbar, 0}(s, y) \quad (\text{A.7})$$

avec

$$\begin{cases} \hat{\alpha} &= \hbar\alpha \\ \hat{\beta} &= \hbar\beta \\ \hat{\gamma} &= \hbar\gamma \\ \hat{\lambda} &= \sqrt{\hbar}(\beta a + \alpha\eta + \lambda - \dot{a}) \\ \hat{\mu} &= \sqrt{\hbar}(\dot{\eta} + \gamma a + \beta^t\eta + \mu) \\ \hat{\nu} &= (\beta a + \alpha\eta + \lambda - \dot{a}, \eta) + \dot{S} - \left(\frac{1}{2}(\eta, \alpha\eta) - \frac{1}{2}(a, \gamma a) - (\mu, a) - \nu\right) \end{cases}$$

et où on veut vérifier que

$$\varphi_{\hbar,0}(s, y) = \hbar^{-d/4}\psi_0(A(s), B(s), y)$$

est solution de (A.7). En utilisant (3.27), il reste alors à voir que

$$i\frac{\partial}{\partial s}\varphi_{\hbar,0}(s, y) = H[-\alpha, -i\beta, \gamma, 0, 0, 0](y, \nabla_y, s)\varphi_{\hbar,0}(s, y).$$

Or, en utilisant le Lemme A.2, on a

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial s}\varphi_{\hbar,0}(s, y) &= i\hbar^{-d/4}(D_A\psi_0(A, B, y)(\dot{A}) + D_B\psi_0(A, B, y)(\dot{B})) \\ &= \frac{i}{2}\left[(\nabla_y, \dot{A}B^{-1}\nabla_y) - (y, \dot{B}A^{-1}y)\right]\varphi_{\hbar,0}(s, y) \\ &= H[i\dot{A}B^{-1}, 0, -i\dot{B}A^{-1}, 0, 0, 0](y, \nabla_y, s)\varphi_{\hbar,0}(s, y). \end{aligned}$$

Et on conclut en utilisant (3.27) et le Lemme A.3 avec $M = iBA^{-1}$ où $(A, B) \in \mathcal{V}$.

2. On suppose le résultat vrai pour l et on va le montrer pour $l + 1_j$ en utilisant le Lemme A.4

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi_{\hbar,l+1_j}(t, x)) &= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\mathcal{A}_j^*(t)\psi_{\hbar,l}(t, x)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}}\left(i\hbar\frac{\partial\mathcal{A}_j^*(t)}{\partial t}\psi_{\hbar,l}(t, x) + \mathcal{A}_j^*(t)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\hbar,l}(t, x)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}}([H(t), \mathcal{A}_j^*(t)]\psi_{\hbar,l}(t, x) + \mathcal{A}_j^*(t)H(t)\psi_{\hbar,l}(t, x)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{l_j+1}}H(t)\mathcal{A}_j^*(t)\psi_{\hbar,l}(t, x) \\ &= H(t)\psi_{\hbar,l+1_j}(t, x). \end{aligned}$$

□

Annexe B

Preuves du Chapitre 4

B.1 Preuve de la Proposition 4.2 : Asymptotiques des quantités classiques

Pour obtenir l'asymptotique des quantités solutions du système, on va reprendre la démonstration habituelle basée sur le théorème de point fixe de Picard en contrôlant précisément les dépendances en t et δ tout à fait dans l'esprit des Lemmes 6.1 et 6.2 de [Hagedorn94] ou de la Section 2 de [HagJoye98]. Par ailleurs, on s'intéressera uniquement au cas $\delta \geq 0$ même si les différentes quantités sont définies sur l'ouvert $] -2\delta_0, 2\delta_0[$ afin de donner un sens aux dérivées successives en $\delta = 0$.

B.1.1 Trajectoires classiques associées aux valeurs propres $E_C(x, \delta)$

On commence par choisir κ suffisamment petit pour avoir $\overline{B}(0, \kappa) \subseteq \Omega$.

On pose

$$\begin{cases} N^C := \sup_{\delta \in [0, \delta_0]} \|\eta^{0^C}(\delta)\| \\ R^C := 2 \sup_{(x, \delta) \in \overline{B}(0, \kappa) \times]0, \delta_0]} \|\nabla_x E_C(x, \delta)\| \\ C^C := \sup_{(x, \delta) \in \overline{B}(0, \kappa) \times]0, \delta_0]} \|\rho(x, \delta) \text{Hess}_x E_C(x, \delta)\|. \end{cases}$$

On remarquera tout d'abord que les quantités N^C , R^C et C^C sont finies :

- N^C car η^{0^C} est continue sur le compact $[0, \delta_0]$,
- R^C car E est \mathcal{C}^1 sur le compact $\overline{B}(0, \kappa) \times [0, \delta_0]$ et $\nabla_x \rho$ est bornée sur $\overline{B}(0, \kappa) \times]0, \delta_0]$,
- C^C car E (respectivement ρ) est \mathcal{C}^2 (respectivement continue) sur le compact $\overline{B}(0, \kappa) \times [0, \delta_0]$ et $\rho \text{Hess}_x \rho$ est bornée sur $\overline{B}(0, \kappa) \times]0, \delta_0]$.

Soit alors $T^C > 0$ tel que

$$\begin{cases} R^C T^C & \leq \frac{1}{4} \eta_1^0 \\ (N^C + R^C T^C) T^C & \leq \kappa \\ C^C T^C & \leq \frac{1}{4} r \eta_1^0. \end{cases}$$

Soient $\lambda^C \in]0, \kappa]$ et $\delta^C \in]0, \delta_0]$ tels que

$$\forall (x, \delta) \in \left\{ x \in \overline{B}_\infty(0, \lambda^C) / \|x\|_\infty \leq \frac{2}{\eta_1^0 T^C} |x_1| \right\} \times]0, \delta^C], \quad \begin{cases} \rho(x, \delta)^2 & \geq \frac{r^2}{4} (x_1^2 + \delta^2) \\ |\eta_1^{0^C}(\delta)| & \geq \frac{3}{4} \eta_1^0. \end{cases}$$

On note

$$B_{\tilde{T}, \tilde{\delta}} := (] -\tilde{T}, \tilde{T}[-\{0\}) \times]0, \tilde{\delta}]$$

$$\|u\|_{\infty, \tilde{T}, \tilde{\delta}} := \sup_{(t, \delta) \in B_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}} \|u(t, \delta)\| \text{ pour } u \in \mathcal{F}(B_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}; \mathbb{R}^n)$$

$$\left\| \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right\|_{Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}} := \left\| \frac{u(t, \delta)}{t^2} \right\|_{\infty, \tilde{T}, \tilde{\delta}} + \left\| \frac{v(t, \delta)}{t} \right\|_{\infty, \tilde{T}, \tilde{\delta}}$$

$$Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}} := \left\{ \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \in \mathcal{F}(]0, \tilde{\delta}]; \mathcal{C}^0(]-\tilde{T}, \tilde{T}[; \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)) / \left\| \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right\|_{Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}} < +\infty \right\}$$

$$\overline{B}_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}(R) := \left\{ \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \in Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}} / \left\| \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right\|_{Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}} \leq R \right\}.$$

On vérifie aisément que $(Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}, \|\cdot\|_{Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}})$ est un espace de Banach, en particulier $\overline{B}_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}(R)$ est un espace métrique complet. On définit alors $\mathcal{A}^c : \overline{B}_{T^c, \delta^c}(R^c) \mapsto \overline{B}_{T^c, \delta^c}(R^c)$ par

$$\mathcal{A}^c \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} : (t, \delta) \mapsto \begin{pmatrix} \int_0^t v(s, \delta) ds \\ - \int_0^t \nabla_x E_C(\eta^{0^c}(\delta)s + u(s, \delta), \delta) ds \end{pmatrix}.$$

Vérifions tout d'abord que \mathcal{A}^c est bien définie : soit $w = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \in \overline{B}_{T^c, \delta^c}(R^c)$, il est clair que l'image de w par \mathcal{A}^c est, à δ fixé, continue en t , par ailleurs on a

$$\left\| \frac{1}{t^2} \int_0^t v(s, \delta) ds \right\| \leq \frac{1}{t^2} \left| \int_0^t s \left\| \frac{v(s, \delta)}{s} \right\| ds \right| \leq \frac{1}{t^2} \int_0^{|t|} s ds R^c = \frac{R^c}{2}$$

$$\left\| \frac{1}{t} \int_0^t \nabla_x E_C(\eta^{0^c}(\delta)s + u(s, \delta), \delta) ds \right\| \leq \sup_{(x, \delta) \in \overline{B}(0, \kappa) \times]0, \delta^c]} \|\nabla_x E_C(x, \delta)\| = \frac{R^c}{2}$$

car $\|\eta^{0^c}(\delta)s + u(s, \delta)\| \leq (N^c + R^c T^c) T^c \leq \kappa$, d'où $\mathcal{A}^c w \in \overline{B}_{T^c, \delta^c}(R^c)$.

Montrons maintenant que \mathcal{A}^c est strictement contractante : soient $w_1 = \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix}$ et $w_2 = \begin{pmatrix} u_2 \\ v_2 \end{pmatrix}$ dans $\overline{B}_{T^c, \delta^c}(R^c)$, on pose $\begin{pmatrix} u_3 \\ v_3 \end{pmatrix} = \mathcal{A}^c w_1 - \mathcal{A}^c w_2$, on a alors

$$\begin{aligned} \left\| \frac{u_3(t, \delta)}{t^2} \right\| &= \frac{1}{t^2} \left\| \int_0^t (v_1(s, \delta) - v_2(s, \delta)) ds \right\| \leq \frac{1}{t^2} \int_0^{|t|} s ds \left\| \frac{v_1(t, \delta) - v_2(t, \delta)}{t} \right\|_{\infty, T^c, \delta^c} \\ &= \frac{1}{2} \left\| \frac{v_1(t, \delta) - v_2(t, \delta)}{t} \right\|_{\infty, T^c, \delta^c}. \end{aligned}$$

Par ailleurs, d'après le théorème des accroissements finis

$$\left\| \nabla_x E_C(\eta^{0^c}(\delta)s + u_1(s, \delta), \delta) - \nabla_x E_C(\eta^{0^c}(\delta)s + u_2(s, \delta), \delta) \right\| \leq \max_{\theta \in [0, 1]} \|\text{Hess}_x E_C(\zeta(s, \delta, \theta), \delta)\| \cdot \|u_1(s, \delta) - u_2(s, \delta)\|$$

où $\zeta(s, \delta, \theta) = \eta^{0^c}(\delta)s + u_1(s, \delta) + \theta(u_2(s, \delta) - u_1(s, \delta))$. En particulier

$$\|\zeta(s, \delta, \theta)\| \leq \|\eta^{0^c}(\delta)s\| + R^c s^2 \leq (N^c + R^c T^c) |s| \leq 1$$

mais on a aussi

$$|\zeta_1(s, \delta, \theta)| \geq \frac{3}{4} \eta_1^0 |s| - R^c s^2 \geq \left(\frac{3}{4} \eta_1^0 - R^c T^c \right) |s| \geq \frac{\eta_1^0}{2} |s|$$

d'où

$$\|\zeta(s, \delta, \theta)\| \leq \frac{2}{\eta_1^0} (N^C + R^C T^C) |\zeta_1(s, \delta, \theta)| \leq \frac{2}{\eta_1^0 T^C} |\zeta_1(s, \delta, \theta)|$$

et

$$\rho(x, \delta)_{x=\zeta(s, \delta, \theta)}^2 \geq \frac{r^2}{4} (\zeta_1(s, \delta, \theta)^2 + \delta^2) \geq \left(\frac{r}{4} \eta_1^0 |s|\right)^2.$$

Finalement

$$\begin{aligned} \left\| \frac{v_3(t, \delta)}{t} \right\| &= \left\| \frac{1}{t} \int_0^t (\nabla_x E_C(\eta^{0^c}(\delta)s + u_1(s, \delta), \delta) - \nabla_x E_C(\eta^{0^c}(\delta)s + u_2(s, \delta), \delta)) ds \right\| \\ &\leq \frac{1}{|t|} \left| \int_0^t \frac{4C^C}{r\eta_1^0 |s|} \|u_1(s, \delta) - u_2(s, \delta)\| ds \right| \\ &\leq \frac{4C^C}{r\eta_1^0 |t|} \int_0^{|t|} s ds \left\| \frac{u_1(t, \delta) - u_2(t, \delta)}{t^2} \right\|_{\infty, T^c, \delta^c} \\ &\leq \frac{2C^C T^C}{r\eta_1^0} \left\| \frac{u_1(t, \delta) - u_2(t, \delta)}{t^2} \right\|_{\infty, T^c, \delta^c} \\ &\leq \frac{1}{2} \left\| \frac{u_1(t, \delta) - u_2(t, \delta)}{t^2} \right\|_{\infty, T^c, \delta^c} \end{aligned}$$

et $\|\mathcal{A}^C w_1 - \mathcal{A}^C w_2\|_{Y_{T^c, \delta^c}} \leq \frac{1}{2} \|w_1 - w_2\|_{Y_{T^c, \delta^c}}$.

On applique alors le théorème du point fixe de Picard à \mathcal{A}^C qui nous donne l'unicité et l'existence du couple $(u^C, v^C) \in Y_{T^c, \delta^c}$ vérifiant

$$\begin{aligned} u^C(t, \delta) &= \int_0^t v^C(s, \delta) ds \\ v^C(t, \delta) &= - \int_0^t \nabla_x E_C(\eta^{0^c}(\delta)s + u^C(s, \delta), \delta) ds. \end{aligned}$$

On pose finalement

$$\begin{aligned} a^C(t, \delta) &= \eta^{0^c}(\delta)t + u^C(t, \delta) \\ \eta^C(t, \delta) &= \eta^{0^c}(\delta) + v^C(t, \delta), \end{aligned}$$

et en dérivant les relations précédentes, on obtient le lemme suivant.

Lemme B.1 *La solution du système différentiel*

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} a^C(t, \delta) &= \eta^C(t, \delta) \\ \frac{d}{dt} \eta^C(t, \delta) &= -\nabla_x E_C(a^C(t, \delta), \delta) \end{cases}$$

de condition initiale

$$\begin{cases} a^C(0, \delta) &= 0 \\ \eta^C(0, \delta) &= \eta^{0^c}(\delta) \end{cases}$$

vérifie l'asymptotique suivante

$$\begin{cases} a^C(t, \delta) &= \eta^{0^c}(\delta)t + O(t^2) \\ \eta^C(t, \delta) &= \eta^{0^c}(\delta) + O(t) \end{cases}$$

quand t tend vers 0, uniformément en δ .

B.1.2 Trajectoire classique associée à la valeur propre moyenne $E(x, \delta)$

On pose

$$\begin{cases} N_0 := \sup_{\delta \in [0, \delta_0]} \|\eta^0(\delta)\| \\ M_0 := 2 \sup_{\delta \in [0, \delta_0]} \|\nabla_x E(0, \delta)\| \\ C_0 := \sup_{(x, \delta) \in \overline{B}(0, \kappa) \times [0, \delta_0]} \|\text{Hess}_x E(x, \delta)\|. \end{cases}$$

On remarquera tout d'abord que les quantités N_0, R_0 et C_0 sont trivialement finies car toutes les fonctions qui interviennent sont continues sur les compacts où elles sont considérées. On pose enfin $R_0 := \frac{3}{2}N_0C_0 + M_0\sqrt{\frac{C_0}{3}}$.

Soit alors $T_0 > 0$ tel que

$$\begin{cases} N_0T_0 + \frac{1}{2}M_0T_0^2 + R_0T_0^3 \leq \kappa \\ C_0T_0^2 \leq \frac{4}{3}. \end{cases}$$

On note

$$\left\| \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right\|_{Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}} := \left\| \frac{u(t, \delta)}{t^3} \right\|_{\infty, \tilde{T}, \tilde{\delta}} + \left\| \frac{v(t, \delta)}{t^2} \right\|_{\infty, \tilde{T}, \tilde{\delta}}.$$

On peut encore vérifier que $(Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}, \|\cdot\|_{Y_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}})$ est un espace de Banach, en particulier $\overline{B}'_{\tilde{T}, \tilde{\delta}}(R)$ est un espace métrique complet. On définit alors $\mathcal{A}_0 : \overline{B}'_{T_0, \delta_0}(R_0) \mapsto \overline{B}'_{T_0, \delta_0}(R_0)$ par

$$\mathcal{A}_0 \left(\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right) (t, \delta) = \begin{pmatrix} \int_0^t v(s, \delta) ds \\ - \int_0^t \left[\nabla_x E(\eta^0(\delta)s - \nabla_x E(0, \delta)\frac{s^2}{2} + u(s, \delta), \delta) - \nabla_x E(0, \delta) \right] ds \end{pmatrix}.$$

Vérifions tout d'abord que \mathcal{A}_0 est bien définie : soit $w = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \in \overline{B}'_{T_0, \delta_0}(R_0)$, il est clair que l'image de w par \mathcal{A}_0 est, à δ fixé, continue en t , par ailleurs on a

$$\left\| \frac{1}{t^3} \int_0^t v(s, \delta) ds \right\| \leq \frac{1}{|t|^3} \left| \int_0^t s^2 \left\| \frac{v(s, \delta)}{s^2} \right\| ds \right| \leq \frac{1}{|t|^3} \int_0^{|t|} s^2 ds R_0 = \frac{R_0}{3}$$

$$\begin{aligned} & \left\| \frac{1}{t^2} \int_0^t (\nabla_x E(\eta^0(\delta)s - \nabla_x E(0, \delta)\frac{s^2}{2} + u(s, \delta), \delta) - \nabla_x E(0, \delta)) ds \right\| \\ & \leq \frac{1}{t^2} \int_0^{|t|} C_0(N_0s + M_0\frac{s^2}{2} + R_0s^3) ds \\ & = C_0 \left(\frac{1}{2}N_0 + \frac{1}{6}M_0T_0 + \frac{1}{4}R_0T_0^2 \right) \\ & \leq \frac{1}{2}C_0N_0 + \frac{1}{3}M_0\sqrt{\frac{C_0}{3}} + \frac{R_0}{3} \\ & = \frac{2R_0}{3} \end{aligned}$$

car $\|\eta^0(\delta)s - \nabla_x E(0, \delta)\frac{s^2}{2} + u(s, \delta)\| \leq N_0T_0 + \frac{1}{2}M_0T_0^2 + R_0T_0^3 \leq \kappa$ et à l'aide des accroissements finis, d'où $\mathcal{A}_0w \in \overline{B}'_{T_0, \delta_0}(R_0)$.

Montrons maintenant que \mathcal{A}_0 est strictement contractante : soient $w_1 = \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix}$ et

$w_2 = \begin{pmatrix} u_2 \\ v_2 \end{pmatrix}$ dans $\overline{B}'_{T_0, \delta_0}(R_0)$, on pose $\begin{pmatrix} u_3 \\ v_3 \end{pmatrix} = \mathcal{A}_0 w_1 - \mathcal{A}_0 w_2$, on a alors

$$\begin{aligned} \left\| \frac{u_3(t, \delta)}{t^3} \right\| &= \frac{1}{|t|^3} \left\| \int_0^t (v_1(s, \delta) - v_2(s, \delta)) ds \right\| \\ &\leq \frac{1}{|t|^3} \int_0^{|t|} s^2 ds \left\| \frac{v_1(t, \delta) - v_2(t, \delta)}{t^2} \right\|_{\infty, T_0, \delta_0} \\ &= \frac{1}{3} \left\| \frac{v_1(t, \delta) - v_2(t, \delta)}{t^2} \right\|_{\infty, T_0, \delta_0} \\ \left\| \frac{v_3(t, \delta)}{t^2} \right\| &\leq \frac{1}{t^2} \left| \int_0^t C_0 \|u_1(s, \delta) - u_2(s, \delta)\| ds \right| \\ &\leq \frac{C_0}{t^2} \int_0^{|t|} s^3 ds \left\| \frac{u_1(t, \delta) - u_2(t, \delta)}{t^3} \right\|_{\infty, T_0, \delta_0} \\ &= \frac{C_0 T_0^2}{4} \left\| \frac{u_1(t, \delta) - u_2(t, \delta)}{t^3} \right\|_{\infty, T_0, \delta_0} \\ &\leq \frac{1}{3} \left\| \frac{u_1(t, \delta) - u_2(t, \delta)}{t^3} \right\|_{\infty, T_0, \delta_0} \end{aligned}$$

et $\|\mathcal{A}_0 w_1 - \mathcal{A}_0 w_2\|'_{Y_{T_0, \delta_0}} \leq \frac{1}{3} \|w_1 - w_2\|'_{Y_{T_0, \delta_0}}$.

On applique alors le théorème du point fixe de Picard à \mathcal{A}_0 pour en déduire les asymptotiques (4.25) et (4.26). \square

B.1.3 Complément pour les trajectoires classiques associées aux valeurs propres $E_C(x, \delta)$

En utilisant le Lemme B.1, on a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \eta^C(t, \delta) &= -\nabla_x E_C(a^C(t, \delta), \delta) \\ &= -\nabla_x E(a^C(t, \delta), \delta) - \nu^C r^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \frac{a_1^C(t, \delta) + O(t^2 + \delta^2)}{\sqrt{r^2(a_1^C(t, \delta))^2 + \delta^2} + O(|t|^3 + \delta^3)} \\ &= -\nabla_x E(0, \delta) - \nu^C r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\eta_1^{0C}(\delta)t}{\sqrt{(\eta_1^{0C}(\delta)t)^2 + \delta^2}} + O(|t| + \delta) \end{aligned}$$

d'où les asymptotiques (4.27) et (4.28). \square

B.1.4 Intégrales d'action classiques

On rappelle qu'on a

$$\begin{aligned} S(t, \delta) &= \int_0^t \left(\frac{1}{2} \|\eta(s, \delta)\|^2 - E(a(s, \delta), \delta) \right) ds \\ S^C(t, \delta) &= \int_0^t \left(\frac{1}{2} \|\eta^C(s, \delta)\|^2 - E_C(a^C(s, \delta), \delta) \right) ds \end{aligned}$$

d'où, en utilisant (4.25)-(4.28), les asymptotiques (4.29) et (4.30). \square

B.1.5 Matrices de déformation du paquet d'ondes associées aux valeurs propres $E_C(x, \delta)$

Dans ce qui suit, on se donne une fois pour toute une norme matricielle sous-multiplicative et on pose

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Soit alors $\delta_0^C \in]0, \delta_0]$ tel que $\delta_0^C \|P\| \leq \frac{\eta_1^0}{64r}$ et pour tout $\delta \in [0, \delta_0^C]$, $\eta_1^{0C}(\delta) \geq \frac{1}{2}\eta_1^0$. On pose aussi

$$L^C := \sup_{(x, \delta) \in \overline{B(0, \kappa)} \times]0, \delta_0^C]} \left\| \text{Hess}_x E_C(x, \delta) - \frac{\nu^C r^4 \delta^2 P}{\rho(x, \delta)^3} \right\|$$

qui est finie (on le voit en écrivant une expression précise de $\text{Hess}_x \rho(x, \delta)$ et en utilisant les développements limités (4.20)).

Soit alors $T_0^C \in]0, T^C]$ tel que

$$L^C T_0^{C^2} \leq \frac{1}{2}.$$

Par les théorèmes classiques sur les systèmes différentiels linéaires, on sait qu'à δ fixé, on a existence et unicité des solutions de

$$\begin{aligned} A^C(t, \delta) &= A_0 + i \int_0^t B^C(s, \delta) ds \\ B^C(t, \delta) &= B_0 + i \int_0^t \text{Hess}_x V^C(a^C(s, \delta), \delta) A^C(s, \delta) ds. \end{aligned}$$

On va maintenant déduire de ce système les asymptotiques des solutions $A^C(t, \delta)$ et $B^C(t, \delta)$. On raisonne pour l'instant à δ fixé,

$$\left\| \frac{A^C(t, \delta) - A_0}{t} \right\| = \left\| \int_0^t \frac{B^C(s, \delta)}{t} ds \right\| \leq \sup_{s \in [0, t]} \|B^C(s, \delta)\|$$

$$\begin{aligned} &\|B^C(s, \delta)\| \\ &\leq \|B_0\| + \left| \int_0^s \left(\frac{r^4 \delta^2 \|P\|}{\rho(a^C(\sigma, \delta), \delta)^3} + L^C \right) \left(\|A_0\| + \sigma \sup_{\tau \in [0, s]} \left\| \frac{A^C(\tau, \delta) - A_0}{\tau} \right\| \right) d\sigma \right| \\ &\leq \|B_0\| + \left(r^4 \|P\| \cdot \left| \int_0^s \frac{\delta^2}{\rho(a^C(\sigma, \delta), \delta)^3} d\sigma \right| + L^C |s| \right) \|A_0\| \\ &\quad + \left(r^4 \|P\| \cdot \left| \int_0^s \frac{\delta^2 \sigma}{\rho(a^C(\sigma, \delta), \delta)^3} d\sigma \right| + \frac{1}{2} L^C s^2 \right) \sup_{\tau \in [0, s]} \left\| \frac{A^C(\tau, \delta) - A_0}{\tau} \right\| \\ &\leq G(s, \delta) + H(s, \delta) \sup_{\tau \in [0, s]} \left\| \frac{A^C(\tau, \delta) - A_0}{\tau} \right\| \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} G(t, \delta) &= \|B_0\| + \left(r^4 \|P\| \cdot \left| \int_0^t \frac{\delta^2}{\rho(a^C(\tau, \delta), \delta)^3} d\tau \right| + L^C |t| \right) \|A_0\| \\ H(t, \delta) &= r^4 \|P\| \cdot \left| \int_0^t \frac{\delta^2 \tau}{\rho(a^C(\tau, \delta), \delta)^3} d\tau \right| + \frac{1}{2} L^C t^2 \end{aligned}$$

puis

$$\left\| \frac{A^c(t, \delta) - A_0}{t} \right\| \leq G(t, \delta) + H(t, \delta) \sup_{s \in [0, t]} \left\| \frac{A^c(s, \delta) - A_0}{s} \right\|$$

et finalement

$$\left\| \frac{A^c - A_0}{t} \right\|_{\infty, T_0^c, \delta_0^c} \leq \frac{G_\infty}{1 - H_\infty},$$

où on a posé $G_\infty = \sup_{(t, \delta) \in [-T_0^c, T_0^c] \times]0, \delta_0]} G(t, \delta)$, $H_\infty = \sup_{(t, \delta) \in [-T_0^c, T_0^c] \times]0, \delta_0]} H(t, \delta)$ et où on a vérifié que $G_\infty < +\infty$ et $H_\infty < 1$:

$$\begin{aligned} G(t, \delta) &\leq \|B_0\| + \left(r\|P\| \int_0^{|t|} \frac{\delta^2}{[(\frac{\eta_1^0 \tau}{4})^2 + \delta^2]^3} d\tau + L^c |t| \right) \|A_0\| \\ &\leq \|B_0\| + \left(\frac{64r\|P\|}{\eta_1^{0^3}} + L^c T_0^c \right) \|A_0\| < +\infty, \end{aligned}$$

$$H(t, \delta) \leq r\|P\| \int_0^{|t|} \frac{\delta^2 \tau}{[(\frac{\eta_1^0 \tau}{4})^2 + \delta^2]^3} d\tau + \frac{1}{2} L^c t^2 \leq \frac{32r\|P\|}{\eta_1^{0^2}} \delta + \frac{1}{2} L^c t^2 \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{4} = \frac{3}{4} < 1.$$

En utilisant cette asymptotique, on a

$$\begin{aligned} &\left\| B^c(t, \delta) - B_0 - i \int_0^t \frac{\nu^c r^4 \delta^2 P A_0}{\rho(a^c(s, \delta), \delta)^3} ds \right\| \\ &= \left\| i \int_0^t \left[\text{Hess}_x E_C(a^c(s, \delta), \delta) A^c(s, \delta) - \frac{\nu^c r^4 \delta^2 P A_0}{\rho(a^c(s, \delta), \delta)^3} \right] ds \right\| \\ &\leq \left| \int_0^t L^c \|A^c(s, \delta)\| ds \right| + \left| \int_0^t \frac{r^4 \delta^2 \|P\| \|A^c(s, \delta) - A_0\|}{\rho(a^c(s, \delta), \delta)^3} ds \right| \\ &\leq L^c \int_0^{|t|} \left[\|A_0\| + \frac{G_\infty}{1 - H_\infty} s \right] ds + \frac{r G_\infty \|P\|}{1 - H_\infty} \left| \int_0^t \frac{\delta^2 s}{\rho(a^c(s, \delta), \delta)^3} ds \right| \\ &\leq L^c \|A_0\| |t| + \frac{G_\infty}{1 - H_\infty} H(t, \delta) \end{aligned}$$

d'où, puisqu'on a au passage démontré que $H(t, \delta) = O(t^2 + \delta)$, les asymptotiques (4.31) et (4.32). \square

B.2 Preuve de la Proposition 4.3

Les deux cas étant similaires, on traite uniquement le cas $t < 0$. On a les asymptotiques suivantes

$$\begin{aligned} a^c(t, \delta) &= \eta^{0^c}(\delta)t + O(t^2), \\ \eta^{0^c}(\delta) &= \eta^0 + O(\delta) \\ b(x, \delta) &= rx_1 + O(\|x\|_\infty^2 + \delta^2), \\ \rho(x, \delta)^2 &= r^2(x_1^2 + \delta^2) + O\left((\|x\|_\infty^2 + \delta^2)^{3/2}\right), \end{aligned}$$

on note donc $C_a, C_\eta, C_b, C_c, C_d$ et C_ρ des constantes strictement positives telles que pour tout $(t, x, \delta) \in [-T, T] \times \overline{B}(0, \kappa) \times [0, \delta_0]$, on a

$$\begin{aligned} \|a^c(t, \delta) - \eta^{0c}(\delta)t\|_\infty &\leq C_a t^2, \\ \|\eta^{0c}(\delta) - \eta^0\| &\leq C_\eta \delta, \\ |b(x, \delta) - r x_1| &\leq C_b(\|x\|_\infty^2 + \delta^2), \\ |c(x, \delta) - r \delta| &\leq C_c(\|x\|_\infty^2 + \delta^2), \\ |d(x, \delta)| &\leq C_d(\|x\|_\infty^2 + \delta^2), \\ |\rho(x, \delta)^2 - r^2(x_1^2 + \delta^2)| &\leq C_\rho(\|x\|_\infty^2 + \delta^2)^{3/2}. \end{aligned}$$

Si $x \in W_-^c(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$, on a, d'une part

$$x_1 = \eta_1^0 t + (x_1 - a_1^c(t, \delta)) + (a_1^c(t, \delta) - \eta_1^{0c}(\delta)t) + (\eta_1^{0c}(\delta)t - \eta_1^0 t),$$

or

$$\begin{aligned} |x_1 - a_1^c(t, \delta)| &\leq \sqrt{2} \frac{\varepsilon}{\gamma} \\ |a_1^c(t, \delta) - \eta_1^{0c}(\delta)t| &\leq C_a t^2 \\ |\eta_1^{0c}(\delta) - \eta_1^0| &\leq C_\eta \delta, \end{aligned}$$

d'où, si $\varepsilon/\gamma \leq \eta_1^0 |t|/(8\sqrt{2})$, $|t| \leq \eta_1^0/(8C_a)$ et $\delta \leq \eta_1^0/(2C_\eta)$,

$$x_1 \leq \eta_1^0 t - \frac{\eta_1^0}{8} t - \frac{\eta_1^0}{8} t - \frac{\eta_1^0}{2} t = \frac{\eta_1^0}{4} t < 0,$$

et d'autre part,

$$x = \eta^0 t + (x - a^c(t, \delta)) + (a^c(t, \delta) - \eta^{0c}(\delta)t) + (\eta^{0c}(\delta)t - \eta^0 t),$$

d'où

$$\|x\|_\infty \leq \|\eta^0\|_\infty |t| + \sqrt{2} \frac{\varepsilon}{\gamma} + C_a t^2 + C_\eta \delta |t| \leq (\|\eta^0\|_\infty + \frac{3\eta_1^0}{4}) |t| = D_t |t|.$$

Voyons d'abord la condition $W_-^c(t, \delta, \varepsilon, \gamma) \subseteq J(\delta)$: d'après ce qui précède on a

$$\frac{\rho(x, \delta)^2}{r^2(x_1^2 + \delta^2)} \geq 1 - \frac{C_\rho(\|x\|_\infty^2 + \delta^2)^{3/2}}{r^2(x_1^2 + \delta^2)} \geq 1 - \frac{C_\rho(D_t^2 t^2 + \delta^2)^{3/2}}{r^2 \frac{\eta_1^{02}}{16} t^2 + \delta^2}$$

d'où, si $t^2 + \delta^2 \leq (r^4 \min(1, \eta_1^{04}/256))/(4C_\rho^2 \max(1, D_t^6))$,

$$\rho(x, \delta)^2 \geq \frac{r^2}{2}(x_1^2 + \delta^2).$$

Voyons maintenant la condition $W_-^c(t, \delta, \varepsilon, \gamma) \subseteq Z_-(\delta)$:

$$\begin{aligned} b(x, \delta) &= r x_1 + (b(x, \delta) - r x_1) < C_b(\|x\|_\infty^2 + \delta^2) \\ &\leq C_b \max\left(1, \frac{16D_t^2}{\eta_1^{02}}\right) (x_1^2 + \delta^2) \leq \rho(x, \delta) \frac{2C_b}{r} \max\left(1, \frac{16D_t^2}{\eta_1^{02}}\right) \sqrt{\frac{\eta_1^{02}}{16} t^2 + \delta^2} \end{aligned}$$

d'où, si $\frac{\eta_1^{02}}{16} t^2 + \delta^2 \leq r/(4C_b \max(1, 16D_t^2/\eta_1^{02}))$,

$$b(x, \delta) < \frac{1}{2} \rho(x, \delta).$$

Finalement quitte à diminuer T et δ_0 , la seule vraie contrainte est $\varepsilon/\gamma \leq \eta_1^0 |t|/(8\sqrt{2})$, qui impose à t de ne pas se rapprocher de 0 plus vite que ε/γ (ce qui est prévisible compte tenu du fait que dans la zone de troncature de rayon $\sqrt{2}\varepsilon/\gamma$, $\rho(x, \delta)$ se comporte comme t). \square

B.3 Preuve du Lemme 4.5

On va traiter uniquement le cas où $\Lambda_{\mathcal{A}}^-(\delta, \varepsilon) = 0$ et $\Lambda_{\mathcal{B}}^-(\delta, \varepsilon) = 1$. L'Ansatz est encore le même que (4.15) à savoir

$$\begin{aligned} \Psi(t, x, y, \delta, \varepsilon) &= F \left(\gamma \frac{\|x - a^{\mathcal{B}}(t)\|}{\varepsilon} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon^2}[S^{\mathcal{B}}(t) + \eta^{\mathcal{B}}(t) \cdot \varepsilon y]} \varepsilon^{-d/2} \psi_l(A^{\mathcal{B}}(t), B^{\mathcal{B}}(t), y) \quad (\text{B.1}) \\ &\times \left[1 + i\varepsilon^2 \left(\frac{|\Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta)\rangle\langle\Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta)|}{E_{\mathcal{A}}(x, \delta) - E_{\mathcal{B}}(x, \delta)} + r_{\mathcal{B}}(x, \delta)P^\perp(x, \delta) \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}}(t) \cdot \nabla_x \right) \right] \Phi_{\mathcal{B}}^-(t, x, \delta) \end{aligned}$$

où $P^\perp(x, \delta) = 1 - P(x, \delta)$ est le projecteur spectral sur l'orthogonal des sous-espaces propres associées aux valeurs propres $E_{\mathcal{A}}(x, \delta)$ et $E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$ et où $r_{\mathcal{B}}(x, \delta)$ est la restriction à $P^\perp(x, \delta)\mathcal{H}$ de la résolvante de $h(x, \delta)$ prise en la valeur $E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$. Comme pour le Théorème 4.1 les termes qui font intervenir les dérivées de la fonction de troncature sont exponentiellement petits et donc négligeables par rapport aux autres, on traitera donc uniquement les termes restants.

Expression des termes d'erreur

On va donner ici les 35 termes qui apparaissent dans la quantité à estimer pour évaluer l'erreur $\exp\left(-\frac{i}{\varepsilon^2}S^{\mathcal{B}}(t) - \frac{i}{\varepsilon}\eta^{\mathcal{B}}(t) \cdot y\right) \varepsilon^{n/2}\Xi(t, x, y, \delta, \varepsilon)$

$$\begin{aligned} &-\varepsilon^4 \varphi_l \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &-\varepsilon^4 \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \left\langle \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &\quad -\varepsilon^4 \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right)^2 \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &\quad -\varepsilon^4 \varphi_l r_{\mathcal{B}} P^\perp \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right)^2 \Phi_{\mathcal{B}}^- \\ &\quad + \frac{\varepsilon^4}{2} \varphi_l \Delta_x \Phi_{\mathcal{B}}^- \\ &+ i \frac{\varepsilon^6}{2} \varphi_l (\Delta_x \Phi_{\mathcal{A}}^-) \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &+ i \frac{\varepsilon^6}{2} \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \Delta_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \right) \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &+ i \frac{\varepsilon^6}{2} \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \left\langle \Delta_x \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &+ i \frac{\varepsilon^6}{2} \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \Delta_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &+ i \varepsilon^6 \varphi_l (\nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^-) \cdot \nabla_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \right) \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &+ i \varepsilon^6 \varphi_l (\nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^-) \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \cdot \left\langle \nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\ &+ i \varepsilon^6 \varphi_l (\nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^-) \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \cdot \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +i\varepsilon^6 \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \nabla_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \right) \cdot \left\langle \nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^- \middle| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& +i\varepsilon^6 \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \nabla_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \right) \cdot \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \middle| \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& +i\varepsilon^6 \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \left\langle \nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^- \middle| \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& \quad +i\frac{\varepsilon^6}{2} \varphi_l (\Delta_x r_{\mathcal{B}}) P^\perp \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& \quad +i\frac{\varepsilon^6}{2} \varphi_l r_{\mathcal{B}} (\Delta_x P^\perp) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& \quad +i\frac{\varepsilon^6}{2} \varphi_l r_{\mathcal{B}} P^\perp \Delta_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& +i\varepsilon^6 \varphi_l (\nabla_x r_{\mathcal{B}}) \cdot (\nabla_x P^\perp) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& +i\varepsilon^6 \varphi_l (\nabla_x r_{\mathcal{B}}) P^\perp \cdot \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& +i\varepsilon^6 \varphi_l r_{\mathcal{B}} (\nabla_x P^\perp) \cdot \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& \quad +\varepsilon^3 \nabla_y \varphi_l \cdot (\nabla_x \Phi_{\mathcal{B}}^-) \\
& +i\varepsilon^5 \nabla_y \varphi_l \cdot (\nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^-) \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \middle| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& +i\varepsilon^5 \nabla_y \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \nabla_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \right) \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \middle| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& +i\varepsilon^5 \nabla_y \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \cdot \left\langle \nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^- \middle| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& +i\varepsilon^5 \nabla_y \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \cdot \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \middle| \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& \quad +i\varepsilon^5 \nabla_y \varphi_l \cdot (\nabla_x r_{\mathcal{B}}) P^\perp \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& \quad +i\varepsilon^5 \nabla_y \varphi_l r_{\mathcal{B}} \cdot (\nabla_x P^\perp) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& \quad +i\varepsilon^5 \nabla_y \varphi_l r_{\mathcal{B}} P^\perp \cdot \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& -\varepsilon^4 \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_{\mathcal{B}}} \right) \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \middle| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& \quad -\varepsilon^4 \varphi_l \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x (r_{\mathcal{B}}) P^\perp \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& \quad -\varepsilon^4 \varphi_l r_{\mathcal{B}} \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x (P^\perp) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \\
& \quad -E_{\mathcal{B}}^{[3]} \varphi_l \Phi_{\mathcal{B}}^-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i\varepsilon^2 E_B^{[3]} \varphi_l \Phi_{\mathcal{A}}^- \frac{1}{E_{\mathcal{A}} - E_B} \left\langle \Phi_{\mathcal{A}}^- \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^B \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^- \right\rangle \\
& -i\varepsilon^2 E_B^{[3]} \varphi_l r_B P^\perp \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^B \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{B}}^-.
\end{aligned}$$

On va majorer chacun des termes brutalement quand ils font intervenir un produit, on est donc ramené à estimer les termes singuliers suivants sur le support de troncature :

- les dérivées successives du gap entre les deux valeurs propres

$$\begin{aligned}
\frac{1}{E_{\mathcal{A}}(x, \delta) - E_{\mathcal{B}}(x, \delta)} &= \frac{1}{2\rho(x, \delta)}, \\
\nabla_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}}(x, \delta) - E_{\mathcal{B}}(x, \delta)} \right) &= -\frac{\nabla_x \rho(x, \delta)}{2\rho(x, \delta)^2}, \\
\Delta_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}}(x, \delta) - E_{\mathcal{B}}(x, \delta)} \right) &= \frac{|\nabla_x \rho(x, \delta)|^2}{\rho(x, \delta)^3} - \frac{\Delta_x \rho(x, \delta)}{\rho(x, \delta)^2},
\end{aligned}$$

- les dérivées successives des vecteurs propres dynamiques (on a noté $\Phi_{\mathcal{C}}^-(t)$ les vecteurs propres dynamiques et $\Phi_{\mathcal{C}}^-$ les vecteurs propres statiques)

$$\nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = i\nabla_x \omega_{\mathcal{C}}^- \Phi_{\mathcal{C}}^-(t) + e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-,$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^B \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{A}}^-(t, x, \delta) &= e^{i\omega_{\mathcal{A}}^-} \eta^B \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^- \\
& - \langle \Phi_{\mathcal{A}}^- | \eta^A \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^- \rangle \Phi_{\mathcal{A}}^-(t) + i(\eta^B - \eta^A) \cdot \nabla_x \omega_{\mathcal{A}}^- \Phi_{\mathcal{A}}^-(t),
\end{aligned}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^C \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- - \langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle \Phi_{\mathcal{C}}^-(t),$$

$$\Delta_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = i\Delta_x \omega_{\mathcal{C}}^- \Phi_{\mathcal{C}}^-(t) + i\nabla_x \omega_{\mathcal{C}}^- \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(t) + ie^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} \nabla_x \omega_{\mathcal{C}}^- \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- + e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} \Delta_x \Phi_{\mathcal{C}}^-,$$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^C \cdot \nabla_x \right)^2 \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = \\
& e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} [(\eta^C \cdot \nabla_x)^2 - \nabla_x E_{\mathcal{C}}(a^C(t), \delta) \cdot \nabla_x - 2 \langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle \eta^C \cdot \nabla_x] \Phi_{\mathcal{C}}^- \\
& + \left[\langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle^2 + \langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | \nabla_x E_{\mathcal{C}}(a^C(t), \delta) \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle \right] \Phi_{\mathcal{C}}^-(t) \\
& - [\|\eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-\|^2 + \langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | (\eta^C \cdot \nabla_x)^2 \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle] \Phi_{\mathcal{C}}^-(t),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^C \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = \\
& e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} [i\nabla_x \omega_{\mathcal{C}}^- + \nabla_x] (\eta^C \cdot \nabla_x) \Phi_{\mathcal{C}}^- - \langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(t) \\
& - [\langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | (\eta^C \cdot \nabla_x) \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle + \langle \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- | \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle] \Phi_{\mathcal{C}}^-(t),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \Delta_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^C \cdot \nabla_x \right) \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = \\
& (i\Delta_x \omega_{\mathcal{C}}^- - |\nabla_x \omega_{\mathcal{C}}^-|^2) e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- + 2ie^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} \nabla_x \omega_{\mathcal{C}}^- \cdot \nabla_x (\eta^C \cdot \nabla_x) \Phi_{\mathcal{C}}^- \\
& + 2 [\langle \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- | \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle + \langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | \nabla_x (\eta^C \cdot \nabla_x) \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle] \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(t) \\
& + e^{i\omega_{\mathcal{C}}^-} \Delta_x (\eta^C \cdot \nabla_x) \Phi_{\mathcal{C}}^- + \langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle \Delta_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(t) \\
& - \left[\langle \Delta_x \Phi_{\mathcal{C}}^- | \eta^C \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle + 2 \langle \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^- | \nabla_x (\eta^C \cdot \nabla_x) \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle \right. \\
& \left. + \langle \Phi_{\mathcal{C}}^- | \Delta_x (\eta^C \cdot \nabla_x) \Phi_{\mathcal{C}}^- \rangle \right] \Phi_{\mathcal{C}}^-(t),
\end{aligned}$$

– les dérivées successives de la résolvante réduite en $E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$ restreinte à $P^\perp(x, \delta)\mathcal{H}$

$$\nabla_x r_{\mathcal{B}}(x, \delta),$$

$$\Delta_x r_{\mathcal{B}}(x, \delta),$$

– les dérivées successives du projecteur spectral associé aux deux valeurs propres $\{E_{\mathcal{A}}(x, \delta), E_{\mathcal{B}}(x, \delta)\}$ qui est \mathcal{C}^3 sur $\Omega \times]-2\delta_0, 2\delta_0[$

$$\nabla_x P^\perp(x, \delta) = -\nabla_x P(x, \delta),$$

$$\Delta_x P^\perp(x, \delta) = -\Delta_x P(x, \delta).$$

Vecteurs propres statiques et leurs dérivées

$$\Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta) = g^- \psi_1 + f^- \psi_2, \quad (\text{B.2})$$

$$\Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta) = -f^- \psi_1 + \overline{g^-} \psi_2, \quad (\text{B.3})$$

$$\nabla_x \Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta) = \nabla_x g^- \psi_1 + \nabla_x f^- \psi_2 + g^- \nabla_x \psi_1 + f^- \nabla_x \psi_2, \quad (\text{B.4})$$

$$\nabla_x \Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta) = -\nabla_x f^- \psi_1 + \nabla_x \overline{g^-} \psi_2 - f^- \nabla_x \psi_1 + \overline{g^-} \nabla_x \psi_2. \quad (\text{B.5})$$

A partir d'ici, on ne précise que les dérivées successives de $\Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta)$, celles de $\Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta)$ étant analogues.

$$\begin{aligned} \text{Hess}_x \Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta) &= \text{Hess}_x g^- \psi_1 + \text{Hess}_x f^- \psi_2 + 2\text{Sym}(\nabla_x g^- \cdot \nabla_x \psi_1^t) \\ &\quad + 2\text{Sym}(\nabla_x f^- \cdot \nabla_x \psi_2^t) + g^- \text{Hess}_x \psi_1 + f^- \text{Hess}_x \psi_2, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} \Delta_x \Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta) &= \Delta_x g^- \psi_1 + \Delta_x f^- \psi_2 + 2\nabla_x g^- \cdot \nabla_x \psi_1 + 2\nabla_x f^- \cdot \nabla_x \psi_2 \\ &\quad + g^- \Delta_x \psi_1 + f^- \Delta_x \psi_2, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} \nabla_x \Delta_x \Phi_{\mathcal{A}}^-(x, \delta) &= \nabla_x \Delta_x g^- \psi_1 + \nabla_x \Delta_x f^- \psi_2 + \Delta_x g^- \nabla_x \psi_1 + \Delta_x f^- \nabla_x \psi_2 \\ &\quad + \nabla_x g^- \Delta_x \psi_1 + \nabla_x f^- \Delta_x \psi_2 + g^- \nabla_x \Delta_x \psi_1 + f^- \nabla_x \Delta_x \psi_2 \\ &\quad + 2\text{Hess}_x g^- \nabla_x \psi_1 + 2\text{Hess}_x f^- \nabla_x \psi_2 \\ &\quad + 2\text{Hess}_x \psi_1 \nabla_x g^- + 2\text{Hess}_x \psi_2 \nabla_x f^-. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Phases corrigées et leurs dérivées

On rappelle qu'on a

$$\omega_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = i \int_{-T}^t \langle \Phi_{\mathcal{C}}^-(x + a^{\mathcal{C}}(\tau) - a^{\mathcal{C}}(t), \delta) | \eta^{\mathcal{C}}(\tau) \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(x + a^{\mathcal{C}}(\tau) - a^{\mathcal{C}}(t), \delta) \rangle d\tau.$$

En particulier,

$$\begin{aligned} \nabla_x \omega_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) &= \\ &\quad i \int_{-T}^t \nabla_x \langle \Phi_{\mathcal{C}}^-(x + a^{\mathcal{C}}(\tau) - a^{\mathcal{C}}(t), \delta) | \eta^{\mathcal{C}}(\tau) \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(x + a^{\mathcal{C}}(\tau) - a^{\mathcal{C}}(t), \delta) \rangle d\tau, \\ \Delta_x \omega_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) &= \\ &\quad i \int_{-T}^t \Delta_x \langle \Phi_{\mathcal{C}}^-(x + a^{\mathcal{C}}(\tau) - a^{\mathcal{C}}(t), \delta) | \eta^{\mathcal{C}}(\tau) \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(x + a^{\mathcal{C}}(\tau) - a^{\mathcal{C}}(t), \delta) \rangle d\tau. \end{aligned}$$

Estimation des quantités fondamentales

Les calculs précédents mettent en valeur que les quantités fondamentales à estimer sont les fonctions ρ , f^- et g^- ainsi que leurs dérivées. Or on a

– pour (L, l) l'un des couples de lettres (B, b) , (C, c) ou (D, d)

$$L(x, \delta) = \frac{l(x, \delta)}{\rho(x, \delta)},$$

$$\nabla_x L(x, \delta) = \frac{\nabla_x l - L \nabla_x \rho}{\rho},$$

$$\text{Hess}_x L(x, \delta) = \frac{\text{Hess}_x l - L \text{Hess}_x \rho}{\rho} + 2 \frac{L \nabla_x \rho \cdot \nabla_x \rho^t - \text{Sym}(\nabla_x l \cdot \nabla_x \rho^t)}{\rho^2},$$

$$\Delta_x L(x, \delta) = \frac{\Delta_x l - L \Delta_x \rho}{\rho} + 2 \frac{L |\nabla_x \rho|^2 - \nabla_x l \cdot \nabla_x \rho}{\rho^2},$$

$$\begin{aligned} \nabla_x \Delta_x L(x, \delta) &= \frac{\nabla_x \Delta_x l - L \nabla_x \Delta_x \rho - \Delta_x \rho \nabla_x L}{\rho} - 4 \frac{L |\nabla_x \rho|^2 - \nabla_x l \cdot \nabla_x \rho}{\rho^3} \nabla_x \rho \\ &+ 2 \frac{\nabla_x L |\nabla_x \rho|^2 + 2L \text{Hess}_x \rho \nabla_x \rho - \text{Hess}_x l \nabla_x \rho - \text{Hess}_x \rho \nabla_x l}{\rho^2} - \frac{\Delta_x l - L \Delta_x \rho}{\rho^2} \nabla_x \rho \quad ; \end{aligned}$$

– pour ρ

$$\rho(x, \delta) = \sqrt{b^2 + c^2 + d^2},$$

$$\nabla_x \rho(x, \delta) = B \nabla_x b + C \nabla_x c + D \nabla_x d,$$

$$\text{Hess}_x \rho(x, \delta) = B \text{Hess}_x b + C \text{Hess}_x c + D \text{Hess}_x d + \nabla_x B \cdot \nabla_x b^t + \nabla_x C \cdot \nabla_x c^t + \nabla_x D \cdot \nabla_x d^t,$$

$$\Delta_x \rho(x, \delta) = B \Delta_x b + C \Delta_x c + D \Delta_x d + \nabla_x B \cdot \nabla_x b + \nabla_x C \cdot \nabla_x c + \nabla_x D \cdot \nabla_x d,$$

$$\begin{aligned} \nabla_x \Delta_x \rho(x, \delta) &= B \nabla_x \Delta_x b + C \nabla_x \Delta_x c + D \nabla_x \Delta_x d + \Delta_x b \nabla_x B + \Delta_x c \nabla_x C + \Delta_x d \nabla_x D \\ &+ 2 \left(\text{Hess}_x b \nabla_x B + \text{Hess}_x c \nabla_x C + \text{Hess}_x d \nabla_x D \right. \\ &\left. + \text{Hess}_x B \nabla_x b + \text{Hess}_x C \nabla_x c + \text{Hess}_x D \nabla_x d \right) \quad ; \end{aligned}$$

– pour f^-

$$f^-(x, \delta) = \sqrt{\frac{1-B}{2}},$$

$$\nabla_x f^-(x, \delta) = -\frac{\nabla_x B}{2\sqrt{2(1-B)}},$$

$$\text{Hess}_x f^-(x, \delta) = -\frac{\text{Hess}_x B}{2\sqrt{2(1-B)}} - \frac{\nabla_x B \cdot \nabla_x B^t}{4\sqrt{2}(1-B)^{3/2}},$$

$$\Delta_x f^-(x, \delta) = -\frac{\Delta_x B}{2\sqrt{2(1-B)}} - \frac{|\nabla_x B|^2}{4\sqrt{2}(1-B)^{3/2}},$$

$$\begin{aligned} \nabla_x \Delta_x f^-(x, \delta) &= -\frac{\nabla_x \Delta_x B}{2\sqrt{2(1-B)}} - \frac{\text{Hess}_x B \nabla_x B}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} \\ &\quad - \frac{\Delta_x B \nabla_x B}{4\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} - \frac{3|\nabla_x B|^2 \nabla_x B}{8\sqrt{2}(1-B)^{5/2}} \quad ; \end{aligned}$$

– pour g^-

$$g^-(x, \delta) = \frac{A}{\sqrt{2(1-B)}},$$

$$\nabla_x g^-(x, \delta) = \frac{\nabla_x A}{\sqrt{2(1-B)}} + \frac{A \nabla_x B}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}},$$

$$\begin{aligned} \text{Hess}_x g^-(x, \delta) &= \frac{\text{Hess}_x A}{\sqrt{2(1-B)}} + \frac{A \text{Hess}_x B}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} \\ &\quad + \frac{\text{Sym}(\nabla_x A \cdot \nabla_x B^t)}{\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} + \frac{3A \nabla_x B \cdot \nabla_x B^t}{4\sqrt{2}(1-B)^{5/2}}, \end{aligned}$$

$$\Delta_x g^-(x, \delta) = \frac{\Delta_x A}{\sqrt{2(1-B)}} + \frac{A \Delta_x B}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} + \frac{\nabla_x A \cdot \nabla_x B}{\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} + \frac{3A |\nabla_x B|^2}{4\sqrt{2}(1-B)^{5/2}},$$

$$\nabla_x \Delta_x g^-(x, \delta) = \frac{\nabla_x \Delta_x A}{\sqrt{2}(1-B)} + \frac{\Delta_x B \nabla_x A + A \nabla_x \Delta_x B}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} + \frac{\Delta_x A \nabla_x B}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}}$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{\text{Hess}_x A \nabla_x B + \text{Hess}_x B \nabla_x A}{\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} + 3 \frac{|\nabla_x B|^2 \nabla_x A + 2A \text{Hess}_x B \nabla_x B}{4\sqrt{2}(1-B)^{5/2}} + \frac{\Delta_x A \nabla_x B}{2\sqrt{2}(1-B)^{3/2}} \\ &+ \frac{3A \Delta_x B \nabla_x B}{4\sqrt{2}(1-B)^{5/2}} + \frac{3 \nabla_x A \cdot \nabla_x B \nabla_x B}{2\sqrt{2}(1-B)^{5/2}} + \frac{15A |\nabla_x B|^2 \nabla_x B}{8\sqrt{2}(1-B)^{7/2}}. \end{aligned}$$

On rappelle qu'on s'intéresse à ces quantités pour $x \in U^c(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$ d'où

– pour (L, l) et ρ

$$\nabla_x b = O(1), \quad \nabla_x c = O(|t| + \delta), \quad \nabla_x d = O(|t| + \delta),$$

$$\nabla_x \rho = O(1), \quad \nabla_x L = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right),$$

$$\text{Hess}_x l = O(1), \quad \text{Hess}_x \rho = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \quad \text{Hess}_x L = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right),$$

$$\nabla_x \Delta_x l = O(1), \quad \nabla_x \Delta_x \rho = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right), \quad \nabla_x \Delta_x L = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^3}\right) \quad ;$$

– pour f^-

$$f = O(1), \quad \nabla_x f = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right),$$

$$\text{Hess}_x f = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right), \quad \nabla_x \Delta_x f = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^3}\right) \quad ;$$

– pour g^-

$$g = O(1), \quad \nabla_x g = O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right),$$

$$\text{Hess}_x g = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right), \quad \nabla_x \Delta_x g = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^3}\right).$$

Ainsi,

– pour les vecteurs propres statiques

$$\begin{aligned}\nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(x, \delta) &= O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \quad \text{Hess}_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(x, \delta) = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right), \\ \nabla_x \Delta_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(x, \delta) &= O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^3}\right) \quad ;\end{aligned}$$

– pour les phases corrigées, en tenant compte du fait que $\rho \geq R(|t| + \delta)$ sur l'intervalle d'intégration (cf. Proposition 4.3),

$$\nabla_x \omega_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = O\left(\ln \frac{1}{|t| + \delta}\right), \quad \Delta_x \omega_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) = O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right).$$

Estimations finales

En particulier, on a donc les estimations suivantes

– pour le gap entre les deux valeurs propres

$$\begin{aligned}\frac{1}{E_{\mathcal{A}}(x, \delta) - E_{\mathcal{B}}(x, \delta)} &= O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \\ \nabla_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}}(x, \delta) - E_{\mathcal{B}}(x, \delta)}\right) &= O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right), \\ \Delta_x \left(\frac{1}{E_{\mathcal{A}}(x, \delta) - E_{\mathcal{B}}(x, \delta)}\right) &= O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^3}\right),\end{aligned}$$

– pour les vecteurs propres

$$\begin{aligned}\nabla_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) &= O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x\right) \Phi_{\mathcal{A}}^-(t, x, \delta) &= O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{C}} \cdot \nabla_x\right) \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) &= O\left(\frac{1}{|t| + \delta}\right), \\ \Delta_x \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) &= O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right), \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{C}} \cdot \nabla_x\right)^2 \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) &= O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right), \\ \nabla_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{C}} \cdot \nabla_x\right) \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) &= O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^2}\right), \\ \Delta_x \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta^{\mathcal{C}} \cdot \nabla_x\right) \Phi_{\mathcal{C}}^-(t, x, \delta) &= O\left(\frac{1}{(|t| + \delta)^3}\right),\end{aligned}$$

– pour la résolvante réduite en $E_{\mathcal{B}}(x, \delta)$ restreinte à $P^\perp(x, \delta)\mathcal{H}$

$$\nabla_x r_{\mathcal{B}}(x, \delta) = O(1), \quad \Delta_x r_{\mathcal{B}}(x, \delta) = O(1),$$

– pour le projecteur spectral associé aux deux valeurs propres $\{E_{\mathcal{A}}(x, \delta), E_{\mathcal{B}}(x, \delta)\}$

$$\nabla_x P^\perp(x, \delta) = O(1), \quad \Delta_x P^\perp(x, \delta) = O(1).$$

Finalement $\|\varepsilon^{n/2}\Xi(t, x, y, \delta, \varepsilon)\|_{L^\infty(x), L^2(y)}$ est majoré par

$$C \left[\left(\frac{\varepsilon^4}{(|t| + \delta)^3} + \frac{\varepsilon^6}{(|t| + \delta)^4} \right) \|\varphi_l\|_{L^2} + \left(\frac{\varepsilon^3}{|t| + \delta} + \frac{\varepsilon^5}{(|t| + \delta)^3} \right) \|\nabla_y \varphi_l\|_{L^2} \right. \\ \left. + \left(\varepsilon^3 + \frac{\varepsilon^5}{(|t| + \delta)^2} \right) \|\|y\|^3 \varphi_l\|_{L^2} \right],$$

Pour conclure la preuve, on applique alors le Lemme 1.3 et on remarque que le terme en ε^2 dans (B.1) est d'ordre $O\left(\frac{\varepsilon^2}{(|t| + \delta)^2}\right)$. \square

B.4 Asymptotiques des vecteurs propres statiques et dynamiques

B.4.1 Preuve du Lemme 4.7

On a, avec le même type de raisonnement que dans la Section 4.5.1, si $x_1 \neq 0$,

$$|\rho(x, \delta) - r|x_1| \leq \frac{r^2\delta^2 + C_\rho(\|x\|_\infty^2 + \delta^2)^{3/2}}{r|x_1|}.$$

D'où, pour $x \in W_*^C(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$ avec $* = +, -$,

$$|B(x, \delta) - \operatorname{sgn}(t)| = \left| \frac{\operatorname{sgn}(t)b(x, \delta) - \rho(x, \delta)}{\rho(x, \delta)} \right| \\ \leq \frac{|b(x, \delta) - rx_1| + |\rho(x, \delta) - r|x_1||}{\frac{r}{2}|x_1|} \\ \leq 2 \frac{rC_b|x_1|(\|x\|_\infty^2 + \delta^2) + r^2\delta^2 + C_\rho(\|x\|_\infty^2 + \delta^2)^{3/2}}{r^2x_1^2},$$

soit finalement

$$B(x, \delta) - \operatorname{sgn}(t) = O\left(|t| + \frac{\delta^2}{t^2}\right).$$

Par ailleurs,

$$|A(x, \delta)| = \left| \frac{c(x, \delta) + id(x, \delta)}{\rho(x, \delta)} \right| \leq \frac{r\delta + (C_c + C_d)(\|x\|_\infty^2 + \delta^2)}{\frac{r}{2}|x_1|},$$

soit finalement

$$A(x, \delta) = O\left(|t| + \left|\frac{\delta}{t}\right|\right)$$

ce qui permet de conclure. \square

B.4.2 Preuve du Lemme 4.8

On a, toujours avec le même type de raisonnement, si $\delta > 0$,

$$|\rho(x, \delta) - r\delta| \leq \frac{r^2x_1^2 + C_\rho(\|x\|_\infty^2 + \delta^2)^{3/2}}{r\delta}.$$

D'où, pour $x \in W_*^{\mathcal{C}}(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$ avec $*$ = +, −,

$$\begin{aligned} |A(x, \delta) - 1| &= \left| \frac{c(x, \delta) + id(x, \delta) - \rho(x, \delta)}{\rho(x, \delta)} \right| \\ &\leq \frac{|c(x, \delta) + id(x, \delta) - r\delta| + |\rho(x, \delta) - r\delta|}{\frac{r}{2}\delta} \\ &\leq \frac{r(C_c + C_d)\delta(\|x\|_\infty^2 + \delta^2) + r^2x_1^2 + C_\rho(\|x\|_\infty^2 + \delta^2)^{3/2}}{r^2\delta^2}, \end{aligned}$$

soit finalement

$$A(x, \delta) - 1 = O\left(\delta + \frac{t^2}{\delta^2}\right).$$

Par ailleurs,

$$|B(x, \delta)| = \left| \frac{b(x, \delta)}{\rho(x, \delta)} \right| \leq \frac{r|x_1| + C_b(\|x\|_\infty^2 + \delta^2)}{\frac{r}{2}\delta}$$

soit finalement

$$B(x, \delta) = O\left(\delta + \left|\frac{t}{\delta}\right|\right)$$

ce qui permet de conclure. \square

B.4.3 Preuve du Lemme 4.9

Comme on a (4.33), on va chercher à estimer l'erreur commise par rapport à la situation $z = 0$. On va désormais traiter uniquement le cas $(\mathcal{C}, *) = (\mathcal{B}, -)$, les autres étant analogues. On a, en omettant les divers paramètres,

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta), \eta^{\mathcal{B}}(t) \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{B}}^-(x, \delta) \rangle = \\ \eta^{\mathcal{B}} \cdot (f^- \nabla_x f^- + g^- \nabla_x \overline{g^-}) + f^{-2} \lambda_{11} |g^-|^2 \lambda_{22} - f^- \overline{g^-} \lambda_{12} - f^- g^- \lambda_{21} \end{aligned}$$

où $\lambda_{ij}(t, x, \delta) = \langle \psi_i(x, \delta), \eta^{\mathcal{B}}(t) \cdot \nabla_x \psi_j(x, \delta) \rangle$.

Or

$$f^{-2} = \frac{1-B}{2}, \quad |g^-|^2 = \frac{1+B}{2},$$

$$f^- \overline{g^-} = \frac{\overline{A}}{2}, \quad f^- g^- = \frac{A}{2},$$

$$f^- \nabla_x f^- + g^- \nabla_x \overline{g^-} = i \frac{D \nabla_x c - C \nabla_x d}{2(1-B)\rho}.$$

Ainsi il faut mesurer l'erreur entre $L(x, \delta)$ et $L(a^{\mathcal{B}}(t), \delta)$ pour $x \in U^{\mathcal{B}}(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$ où L est chacune des quantités $\rho, B, C, D, \nabla_x c, \nabla_x d$ et λ_{ij} . Pour les quantités précédentes, on pose

$$L_x = L(x, \delta); \quad L_t = L(a^{\mathcal{B}}(t), \delta); \quad [L]_t^x = L_x - L_t,$$

on a alors successivement, pour $x \in U^{\mathcal{B}}(t, \delta, \varepsilon, \gamma)$,

1.

$$[\rho]_t^x = \frac{[\rho^2]_t^x}{\rho_x + \rho_t} = O\left(\frac{\varepsilon|t|}{\gamma(|t| + \delta)} + \frac{\varepsilon}{\gamma}(|t| + \delta)\right)$$

d'après l'inégalité des accroissements finis avec

$$\begin{aligned}\nabla_x(\rho^2) &= 2(b\nabla_x b + c\nabla_x c + d\nabla_x d) = 2r^2 x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + O(\|x\|^2 + \delta^2) \\ &= O(|t| + (|t| + \delta)^2)\end{aligned}$$

et le fait que $\rho(x, \delta) \geq R(|t| + \delta)$;

2.

$$[B]_t^x = \frac{[b]_t^x - B_x[\rho]_t^x}{\rho_t} = O\left(\frac{\varepsilon}{\gamma(|t| + \delta)}\right)$$

toujours d'après l'inégalité des accroissements finis puisque $b(x, \delta)$ est \mathcal{C}^1 sur le compact $W_-^{\mathcal{B}}(0, \delta, \varepsilon, \gamma) \times [0, \delta_0]$ et que $B(x, \delta) \in [0, 1]$;

3.

$$[C]_t^x = \frac{[c]_t^x - C_x[\rho]_t^x}{\rho_t} = O\left(\frac{\varepsilon}{\gamma} + \frac{\varepsilon|t|}{\gamma(|t| + \delta)^2}\right)$$

encore d'après l'inégalité des accroissements finis puisque $\nabla_x c(x, \delta) = O(|t| + \delta)$ et que $C(x, \delta) \in [0, 1]$; et on a un résultat analogue pour D ;

4. puisque $\nabla_x c, \nabla_x d$ et λ_{ij} sont \mathcal{C}^1 sur $W_-^{\mathcal{B}}(0, \delta, \varepsilon, \gamma) \times [0, \delta_0]$, on a bien sûr $[L]_t^x = O(\frac{\varepsilon}{\gamma})$ pour chacune de ces quantités ;

5.

$$\begin{aligned}[f\nabla_x f + g\nabla_x \bar{g}]_t^x &= \frac{i}{2} \left(\frac{[D]_t^x (\nabla_x c)_x - [C]_t^x (\nabla_x d)_x + D_t [\nabla_x c]_t^x - C_t [\nabla_x d]_t^x}{(1 - B_x)\rho_x} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(D\nabla_x c - C\nabla_x d)_t}{(1 - B_t)\rho_x} \left(\frac{[B]_t^x}{1 - B_x} - \frac{[\rho]_t^x}{\rho_t} \right) \right)\end{aligned}$$

d'où, puisque $\nabla_x c = O(|t| + \delta)$ et $\nabla_x d = O(|t| + \delta)$,

$$[f\nabla_x f + g\nabla_x \bar{g}]_t^x = O\left(\frac{\varepsilon}{\gamma(|t| + \delta)}\right).$$

Finalement

$$\langle \Phi_{\mathcal{B}}^- | \eta^{\mathcal{B}} \cdot \nabla_x \Phi_{\mathcal{B}}^- \rangle = O\left(\frac{\varepsilon}{\gamma(|t| + \delta)}\right)$$

et on conclut par intégration sur l'intervalle de temps $[-T, t]$. □

Annexe C

Preuves du Chapitre 5

C.1 Preuve de la Proposition 5.2

- (i) On commence par tronquer l'intervalle d'intégration en s à $[-\hbar^\gamma, \hbar^\gamma]$ avec $\gamma < \frac{1}{2}$ suffisamment grand. On a

$$\begin{aligned} & \left| \int_0^T \left(\int_{\hbar^\gamma \leq |s| \leq T/2} f(t, s) s^{2n} e^{-g(t, s)/\hbar} ds \right) dt \right| \\ & \leq \int_0^T \left(\int_{\hbar^\gamma \leq |s| \leq T/2} \|f\|_\infty \left(\frac{T}{2} \right)^{2n} e^{-rs^2/\hbar} ds \right) dt \leq \|f\|_\infty T^2 \left(\frac{T}{2} \right)^{2n} e^{-r\hbar^2\gamma^{-1}} \end{aligned}$$

si bien qu'il suffit de considérer, quitte à rajouter une erreur exponentiellement petite en \hbar ,

$$\int_0^T \left(\int_{-\hbar^\gamma}^{\hbar^\gamma} f(t, s) s^{2n} e^{-g(t, s)/\hbar} ds \right) dt.$$

- (ii) On tronque $g(t, s)$ à l'ordre 5 en s avec les notations suivantes

$$g(t, s) = \alpha(t) \frac{s^2}{2} + \beta(t) s^3 + \gamma(t) s^4 + \delta(t) s^5 + O(s^6).$$

On a, à l'aide du développement en série de l'exponentielle, pour $|s| \leq \hbar^\gamma$ avec $\gamma > \frac{1}{3}$ (dans le développement, on garde uniquement les termes de la forme $\frac{s^m}{\hbar^p}$ avec $m < 2p + 4$ car sinon la contribution est d'ordre $O\left(\hbar^{n + \frac{m-2p+1}{2}}\right)$ et est donc $O\left(\hbar^{n + \frac{5}{2}}\right)$),

$$\left| e^{-g(t, s)/\hbar} - e^{-\alpha(t)s^2/(2\hbar)} \eta(t, s) \right| \leq C s^4 \left(\frac{s^2}{\hbar} + \frac{s^4}{\hbar^2} + \frac{s^6}{\hbar^3} + \frac{s^8}{\hbar^4} \right) e^{-\alpha(t)s^2/(2\hbar)}$$

où $C > 0$ et

$$\eta(t, s) = 1 - \beta(t) \frac{s^3}{\hbar} - \gamma(t) \frac{s^4}{\hbar} - \delta(t) \frac{s^5}{\hbar} + \frac{\beta(t)^2 s^6}{2 \hbar^2} + \beta(t) \gamma(t) \frac{s^7}{\hbar^2} - \frac{\beta(t)^3 s^9}{6 \hbar^3}.$$

Or, on a

$$\left| \int_0^T \left(\int_{-\hbar^\gamma}^{\hbar^\gamma} f(t, s) s^{2n+4} \left(\frac{s^2}{\hbar} + \frac{s^4}{\hbar^2} + \frac{s^6}{\hbar^3} + \frac{s^8}{\hbar^4} \right) e^{-\alpha(t)s^2/(2\hbar)} ds \right) dt \right|$$

$$\leq \hbar^{n+\frac{5}{2}} \int_0^T \left(\int_{\mathbb{R}} \|f\|_{\infty} \sigma^{2n+4} (\sigma^2 + \sigma^4 + \sigma^6 + \sigma^8) e^{-\alpha(t)\sigma^2/2} d\sigma \right) dt$$

si bien qu'il suffit de considérer, quitte à rajouter une erreur d'ordre $O\left(\hbar^{n+\frac{5}{2}}\right)$,

$$\int_0^T \left(\int_{-\hbar\gamma}^{\hbar\gamma} f(t, s) s^{2n} \eta(t, s) e^{-\alpha(t)s^2/(2\hbar)} ds \right) dt. \quad (\text{C.1})$$

(iii) On tronque $f(t, s)$ à l'ordre 3 en s avec les notations suivantes

$$f(t, s) = \kappa(t) + \lambda(t)s + \mu(t)s^2 + \nu(t)s^3 + O(s^4).$$

Si $\gamma > \frac{1}{3}$, tous les termes à partir de $\frac{s^3}{\hbar}$ dans (C.1) sont bornés sur l'intervalle considéré. Or on a

$$\int_0^T \left(\int_{-\hbar\gamma}^{\hbar\gamma} s^{2n+4} e^{-\alpha(t)s^2/(2\hbar)} ds \right) dt \leq \hbar^{n+\frac{5}{2}} \int_0^T \left(\int_{\mathbb{R}} \sigma^{2n+4} e^{-\alpha(t)\sigma^2/2} d\sigma \right) dt$$

si bien qu'il suffit de considérer, quitte à rajouter une erreur d'ordre $O\left(\hbar^{n+\frac{5}{2}}\right)$,

$$\int_0^T \left[\int_{-\hbar\gamma}^{\hbar\gamma} (\kappa(t) + \lambda(t)s + \mu(t)s^2 + \nu(t)s^3) s^{2n} \eta(t, s) e^{-\alpha(t)s^2/(2\hbar)} ds \right] dt.$$

(iv) On enlève les termes du produit qui produisent des erreurs du même ordre que celles déjà considérées. Ainsi, on garde uniquement

$$\begin{aligned} \chi(t, s) &= \kappa(t)\eta(t, s) \\ &+ \lambda(t) \left(s - \beta(t) \frac{s^4}{\hbar} - \gamma(t) \frac{s^5}{\hbar} + \frac{\beta(t)^2 s^7}{2\hbar^2} \right) + \mu(t) \left(s^2 - \beta(t) \frac{s^5}{\hbar} \right) + \nu(t)s^3. \end{aligned}$$

Les autres termes sont majorés par

$$s^4 \left(\frac{s^2}{\hbar} + \frac{s^4}{\hbar} + \frac{s^6}{\hbar} \right)$$

qui conduit à une erreur du même type qu'en (ii) (à savoir d'ordre $O\left(\hbar^{n+\frac{5}{2}}\right)$).

(v) On étend l'intervalle d'intégration en s à \mathbb{R} . On a, pour $m \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned} \left| \int_{|s| \geq \hbar\gamma} s^m e^{-\alpha s^2/(2\hbar)} ds \right| &= \hbar^{\frac{m+1}{2}} \left| \int_{|\sigma| \geq \hbar\gamma - \frac{1}{2}} \sigma^m e^{-\alpha\sigma^2/2} d\sigma \right| \\ &\leq 2C_m \hbar^{\frac{m+1}{2}} \int_{\hbar\gamma - \frac{1}{2}}^{\infty} \sigma e^{-\alpha\sigma^2/4} d\sigma = \frac{2C_m}{\alpha} \hbar^{\frac{m+1}{2}} e^{-\alpha\hbar^2\gamma^{-1}/4} \end{aligned}$$

avec C_m tel que

$$\sigma^m e^{-\alpha\sigma^2/2} \leq C_m \sigma e^{-\alpha\sigma^2/4}$$

pour σ suffisamment grand. Finalement, il suffit donc de considérer, quitte à rajouter une erreur exponentiellement petite en \hbar ,

$$\int_0^T \left(\int_{\mathbb{R}} s^{2n} \chi(t, s) e^{-\alpha(t)s^2/(2\hbar)} ds \right) dt.$$

- (vi) Les termes avec des puissances impaires de s ne contribuent pas compte tenu de l'imparité globale de la fonction à intégrer sur \mathbb{R} tout entier. Il suffit donc de considérer, avec le changement de variables $s = \sqrt{\hbar}\sigma$,

$$\int_0^T \left(\int_{\mathbb{R}} \left[\kappa(t) \left(\hbar^n \sigma^{2n} - \hbar^{n+1} \gamma(t) \sigma^{2n+4} + \hbar^{n+1} \frac{\beta(t)^2}{2} \sigma^{2n+6} \right) + \hbar^{n+1} \left(-\lambda(t) \beta(t) \sigma^{2n+4} + \mu(t) \sigma^{2n+2} \right) \right] e^{-\alpha(t)\sigma^2/2} \sqrt{\hbar} d\sigma \right) dt.$$

Or, si on pose

$$J_m = \int_{\mathbb{R}} \sigma^{2m} e^{-\alpha\sigma^2/2} d\sigma,$$

on a

$$J_{m+1} = \frac{2m+1}{\alpha} J_m,$$

d'où

$$J_m = (2m-1)(2m-3) \times \cdots \times 3 \times 1 \times \alpha^{-m} J_0 = \sqrt{2\pi} \frac{(2m)!}{2^m m!} \alpha^{-m-\frac{1}{2}}$$

et le résultat en utilisant que

$$\begin{aligned} \beta(t) &= \frac{1}{6} \frac{\partial^3 g}{\partial s^3}(t, 0), & \gamma(t) &= \frac{1}{24} \frac{\partial^4 g}{\partial s^4}(t, 0), \\ \kappa(t) &= f(t, 0), & \lambda(t) &= \frac{\partial f}{\partial s}(t, 0), & \mu(t) &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial s^2}(t, 0). \end{aligned}$$

□

C.2 Preuve du Corollaire 5.3

On rappelle qu'on a

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2X,$$

et qu'en posant

$$\begin{aligned} C(t, s) &= \frac{1}{2} \left[\overline{B(t+s)} A(t) + \overline{A(t+s)} B(t) \right] \\ D(t, s) &= B(t+s) A(t) - A(t+s) B(t) \\ z_1(t, s) &= B(t)(a(t+s) - a(t)) + i A(t)(\eta(t+s) - \eta(t)) \\ z_2(t, s) &= \overline{B(t+s)}(a(t+s) - a(t)) - i \overline{A(t+s)}(\eta(t+s) - \eta(t)) \\ G(t, s) &= S(t+s) - S(t) + s E_0 - \frac{1}{2} (\eta(t+s) + \eta(t))(a(t+s) - a(t)) \\ g(t, s) &= \frac{z_1(t, s) z_2(t, s)}{4C(t, s)} + i G(t, s) \end{aligned}$$

la formule de la Proposition 3.12 donne

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\varphi}_l(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_k(t, \hbar, x) \rangle &= \frac{C^{-\frac{l+k+1}{2}}}{2^{l+k} \sqrt{l!k!}} e^{-\frac{g}{\hbar}} e^{-i \frac{\pi}{\tau(E_0)} s} \\ &\times \sum_{j=0}^{\min(l, k)} C_l^j C_k^j j! 4^j \sqrt{-D}^{l-j} H_{l-j} \left(-\frac{z_1 C^{-1/2}}{\sqrt{2\hbar} \sqrt{-D}} \right) \sqrt{D}^{k-j} H_{k-j} \left(\frac{z_2 C^{-1/2}}{\sqrt{2\hbar} \sqrt{D}} \right). \end{aligned}$$

On a donc

$$\langle \tilde{\varphi}_0(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_0(t, \hbar, x) \rangle = f_0^{0,0}(t, s) e^{-\frac{q(t,s)}{\hbar}}$$

$$\langle \tilde{\varphi}_1(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_1(t, \hbar, x) \rangle = \left[f_0^{1,1}(t, s) + \frac{s^2}{\hbar} f_2^{1,1}(t, s) \right] e^{-\frac{q(t,s)}{\hbar}}$$

avec

$$f_0^{0,0}(t, s) = e^{-i\frac{\pi}{\tau(E_0)}s} C^{-1/2}$$

$$f_0^{1,1}(t, s) = e^{-i\frac{\pi}{\tau(E_0)}s} C^{-3/2}$$

$$f_2^{1,1}(t, s) = -e^{-i\frac{\pi}{\tau(E_0)}s} \frac{z_1 z_2}{2s^2} C^{-5/2}$$

Par ailleurs, on a les développements limités suivants autour de $s = 0$, en omettant la dépendance en t de la plupart des fonctions.

Lemme C.1

$$\begin{aligned} C(t, s) &= 1 - is \frac{E''(a)|A|^2 + |B|^2 + 2\alpha|\theta|^2}{2} \\ &\quad - \frac{s^2}{2} \left[E''(a) + \frac{i}{2}\eta E'''(a)|A|^2 + 2\alpha\bar{\theta} \left(E'(a)B + i\eta E''(a)A \right) \right] + O(s^3) \\ D(t, s) &= is \left[E''(a)A^2 - B^2 + 2\alpha\theta^2 \right] + i\frac{s^2}{2} \left[\eta E'''(a)A^2 - 4i\alpha\theta \left(E'(a)B + i\eta E''(a)A \right) \right] \\ &\quad + O(s^3) \\ z_1(t, s) &= -i\theta s - \frac{s^2}{2} \left[E'(a)B + i\eta E''(a)A \right] + i\frac{s^3}{6} \left[\theta E''(a) - \eta^2 E'''(a)A \right] + O(s^4) \\ z_2(t, s) &= i\bar{\theta}s + \frac{s^2}{2} \left[E'(a)\bar{B} - i\eta E''(a)\bar{A} \right] \\ &\quad - i\frac{s^3}{6} \left[\bar{\theta} E''(a) + 2\eta^2 E'''(a)\bar{A} + 6\alpha\bar{\theta} \left(E'(a)^2 + \eta^2 E''(a) \right) \right] + O(s^4) \\ G(t, s) &= \frac{s^3}{6} \frac{E'(a)^2 + \eta^2 E''(a)}{2} + \eta^3 E'''(a) \frac{s^4}{24} + O(s^5). \end{aligned}$$

Preuve On a

$$\begin{aligned} \dot{A}(t) &= iB(t) + 2\alpha\theta\eta(t) \\ \dot{B}(t) &= iE''(a(t))A(t) + 2i\alpha\theta E'(a(t)) \\ \ddot{A}(t) &= -E''(a(t))A(t) - 4\alpha\theta E'(a(t)) \\ \ddot{B}(t) &= i\eta(t)E'''(a(t))A(t) - E''(a(t))B(t) + 4i\alpha\theta\eta(t)E''(a(t)). \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned} 2C(t, s) &= \\ &\bar{B}A + \bar{A}B + s \left[\left(-iE''(a)\bar{A} - 2i\alpha\bar{\theta}E'(a) \right) A + \left(-i\bar{B} + 2\alpha\bar{\theta}\eta \right) B \right] \\ &\quad - \frac{s^2}{2} \left[\left(i\eta E'''(a)\bar{A} + E''(a)\bar{B} + 4i\alpha\bar{\theta}\eta E''(a) \right) A + \left(E''(a)\bar{A} + 4\alpha\bar{\theta}E'(a) \right) B \right] \\ &\quad + O(s^3) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
D(t, s) = & \\
& s \left[\left(iE''(a)A + 2i\alpha\theta E'(a) \right) A - \left(iB + 2\alpha\theta\eta \right) B \right] \\
& + \frac{s^2}{2} \left[\left(i\eta E'''(a)A - E''(a)B + 4i\alpha\theta\eta E''(a) \right) A - \left(-E''(a)A - 4\alpha\theta E'(a) \right) B \right] \\
& + O(s^3).
\end{aligned}$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned}
\dot{a}(t) &= \eta(t) \\
\dot{\eta}(t) &= \ddot{a}(t) = -E'(a(t)) \\
\ddot{\eta}(t) &= \ddot{a}(t) = -\eta(t)E''(a(t)) \\
\ddot{\eta}(t) &= -\eta(t)^2 E'''(a(t)) + E'(a(t))E''(a(t)).
\end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
z_1(t, s) = & \\
& B(t) \left[s\eta(t) - \frac{s^2}{2}E'(a(t)) - \frac{s^3}{6}\eta(t)E''(a(t)) \right] \\
& + iA(t) \left[-sE'(a(t)) - \frac{s^2}{2}\eta(t)E''(a(t)) + \frac{s^3}{6} \left(-\eta(t)^2 E'''(a(t)) + E'(a(t))E''(a(t)) \right) \right] \\
& + O(s^4)
\end{aligned}$$

et on en déduit aussi le résultat pour $z_2(t, s)$ en utilisant que $z_2(t, s) = \overline{-z_1(t + s, -s)}$.

Enfin,

$$\begin{aligned}
\dot{S}(t) &= \frac{\eta(t)^2}{2} - E(a(t)) \\
\ddot{S}(t) &= -2\eta(t)E'(a(t)) \\
\ddot{\ddot{S}}(t) &= 2E'(a(t))^2 - 2\eta(t)^2 E''(a(t)) \\
\ddot{\ddot{\ddot{S}}}(t) &= 8\eta(t)E'(a(t))E''(a(t)) - 2\eta(t)^3 E'''(a(t)).
\end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
G(t, s) = & \\
& s \left[\frac{\eta^2}{2} - E(a) \right] - \eta E'(a)s^2 + \frac{s^3}{3} [E'(a)^2 - \eta^2 E''(a)] \\
& + \frac{s^4}{12} [4\eta E'(a)E''(a) - \eta^3 E'''(a)] + O(s^5) + s \left[\frac{\eta^2}{2} + E(a) \right] \\
& - \left[\eta - E'(a)\frac{s}{2} - \eta E''(a)\frac{s^2}{4} + \frac{s^3}{12} (E'(a)E''(a) - \eta^2 E'''(a)) + O(s^4) \right] \\
& \times \left[\eta s - E'(a)\frac{s^2}{2} - \eta E''(a)\frac{s^3}{6} + \frac{s^4}{24} (E'(a)E''(a) - \eta^2 E'''(a)) + O(s^5) \right]
\end{aligned}$$

ce qui conclut. □

Pour alléger les écritures, on va maintenant introduire les notations suivantes

$$\begin{aligned} C(t, s) &= 1 - is c_1(t) - \frac{s^2}{2} c_2(t) + O(s^3) \\ D(t, s) &= is d_1(t) + i \frac{s^2}{2} d_2(t) + O(s^3) \\ z_1(t, s) &= -i\theta s - \frac{s^2}{2} u(t) + i \frac{s^3}{6} v(t) + O(s^4) \\ z_2(t, s) &= i\bar{\theta} s + \frac{s^2}{2} \overline{u(t)} - i \frac{s^3}{6} w(t) + O(s^4) \end{aligned}$$

où on a

$$\begin{aligned} u(t) &= E'(a(t))B(t) + i\eta(t)E''(a(t))A(t) \\ v(t) &= \theta E''(a(t)) - \eta(t)^2 E'''(a(t))A(t) \\ u'(t) &= i\eta(t)^2 E'''(a(t))A(t) + 2i\alpha\theta [E'(a(t))^2 + \eta(t)^2 E''(a(t))] \\ w(t) &= \overline{v(t)} + 3i\overline{u'(t)} \\ c_1(t) &= \frac{E''(a(t))|A(t)|^2 + |B(t)|^2}{2} + \alpha|\theta|^2 \\ c_2(t) &= E''(a(t)) + \frac{i}{2}\eta(t)E'''(a(t))|A(t)|^2 + 2\alpha\bar{\theta}u(t) \\ d_1(t) &= E''(a(t))A(t)^2 - B(t)^2 + 2\alpha\theta^2 \\ d_2(t) &= \eta(t)E'''(a(t))A(t)^2 - 4i\alpha\theta u(t). \end{aligned}$$

Des développements limités précédents et avec la notation raccourcie

$$\pi_0 = \frac{\pi}{\tau(E_0)},$$

on tire la proposition suivante.

Proposition C.2

$$\begin{aligned} f_0^{0,0}(t, s) &= 1 + O(s) \\ f_0^{1,1}(t, s) &= 1 + is \left[\frac{3}{2} c_1(t) - \pi_0 \right] + \frac{s^2}{2} \left[\pi_0 (3c_1(t) - \pi_0) + \frac{3}{2} \left(c_2(t) - \frac{5}{2} c_1(t)^2 \right) \right] \\ &\quad + O(s^3) \\ f_2^{1,1}(t, s) &= -\frac{|\theta|^2}{2} + is \left[\frac{1}{2} \Re(\bar{\theta}u(t)) - \frac{|\theta|^2}{2} \left(\frac{5}{2} c_1(t) - \pi_0 \right) \right] \\ &\quad + \frac{s^2}{2} \left[\frac{|u(t)|^2}{4} + \frac{\Re(\bar{\theta}v(t))}{3} + \frac{i}{2} \overline{\theta u'(t)} - \Re(\bar{\theta}u(t)) \left(\frac{5}{2} c_1(t) - \pi_0 \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{|\theta|^2}{2} \left[\frac{5}{2} \left(c_2(t) - \frac{7}{2} c_1(t)^2 \right) + \pi_0 (5c_1(t) - \pi_0) \right] \right] \\ &\quad + O(s^3) \\ g(t, s) &= \frac{|\theta|^2 s^2}{2} + i \frac{s^3}{6} g_3(t) + \frac{s^4}{24} g_4(t) + O(s^5) \end{aligned}$$

où on a posé

$$\begin{aligned}
g_3(t) &= \frac{3}{2}|\theta|^2 c_1(t) - [E'(a(t))^2 + \eta(t)^2 E''(a(t))] \\
g_4(t) &= 3|\theta|^2 (c_2(t) - 2c_1(t)^2) + 6c_1(t) \Re(\bar{\theta}u(t)) - \frac{3}{2}|u(t)|^2 - 2\Re(\bar{\theta}v(t)) \\
&\quad - 3i\overline{\theta u'(t)} + i\eta(t)^3 E'''(a(t)).
\end{aligned}$$

D'où,

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} \langle \tilde{\varphi}_0(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_0(t, \hbar, x) \rangle ds dt \\
&= \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} f_0^{0,0}(t, s) e^{-g(t,s)/\hbar} ds dt \\
&= \frac{2\sqrt{\pi}}{|\theta|} \hbar^{1/2} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} dt + O(\hbar^{3/2})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} \langle \tilde{\varphi}_1(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_1(t, \hbar, x) \rangle ds dt \\
&= \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} f_0^{1,1}(t, s) e^{-g(t,s)/\hbar} ds dt \\
&\quad + \hbar^{-1} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} f_2^{1,1}(t, s) s^2 e^{-g(t,s)/\hbar} ds dt \\
&= \frac{2\sqrt{\pi}}{|\theta|} \hbar^{1/2} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} dt \\
&\quad + \sqrt{2\pi} \hbar^{3/2} \times \left[\frac{\sqrt{2}}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \left[\pi_0 (3c_1(t) - \pi_0) + \frac{3}{2} \left(c_2(t) - \frac{5}{2} c_1(t)^2 \right) \right] dt \right. \\
&\quad + \frac{\sqrt{2}}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \left(2i\overline{\kappa'(t)} \left[\frac{3}{2} c_1(t) - \pi_0 \right] + \overline{\kappa''(t)} \right) dt \\
&\quad - \frac{1}{\sqrt{2}|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} g_4(t) dt \\
&\quad - \frac{2\sqrt{2}}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \left[\overline{\kappa'(t)} + i\overline{\kappa(t)} \left(\frac{3}{2} c_1(t) - \pi_0 \right) \right] g_3(t) dt \\
&\quad \left. + \frac{5\sqrt{2}}{3|\theta|^7} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} g_3(t)^2 dt \right] + O(\hbar^{5/2}) - \frac{2\sqrt{\pi}}{|\theta|} \hbar^{1/2} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} dt \\
&\quad + 3\sqrt{2\pi} \hbar^{3/2} \times \left[\frac{2\sqrt{2}}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \left[\frac{1}{4} |u(t)|^2 + \frac{1}{3} \Re(\overline{\theta} v(t)) + \frac{i}{2} \overline{\theta u'(t)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \Re(\overline{\theta} u(t)) \left(\frac{5}{2} c_1(t) - \pi_0 \right) \right] dt \right. \\
&\quad - \frac{\sqrt{2}}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \left[\pi_0 (5c_1(t) - \pi_0) + \frac{5}{2} \left(c_2(t) - \frac{7}{2} c_1(t)^2 \right) \right] dt \\
&\quad + \frac{2\sqrt{2}}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \left(i\overline{\kappa'(t)} \left[\Re(\overline{\theta} u(t)) - |\theta|^2 \left(\frac{5}{2} c_1(t) - \pi_0 \right) \right] - \frac{|\theta|^2}{2} \overline{\kappa''(t)} \right) dt \\
&\quad + \frac{5}{3\sqrt{2}|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} g_4(t) dt \\
&\quad - \frac{10\sqrt{2}}{3|\theta|^7} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \left(i\overline{\kappa(t)} \left[\Re(\overline{\theta} u(t)) - |\theta|^2 \left(\frac{5}{2} c_1(t) - \pi_0 \right) \right] - |\theta|^2 \overline{\kappa'(t)} \right) g_3(t) dt \\
&\quad \left. - \frac{35\sqrt{2}}{9|\theta|^7} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} g_3(t)^2 dt \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\pi} \hbar^{3/2} \times \left[-\frac{4}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \left[\pi_0 (6c_1(t) - \pi_0) + 3 \left(c_2(t) - \frac{15}{4} c_1(t)^2 \right) \right] dt \right. \\
&\quad + \frac{1}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \left[3|u(t)|^2 + 4\Re(\bar{\theta}v(t)) - 12\Re(\bar{\theta}u(t)) \left(\frac{5}{2} c_1(t) - \pi_0 \right) \right. \\
&\quad \left. \left. + 6i\theta u'(t) \right] dt + \frac{16i}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \left(\frac{11}{4} c_1(t) - \pi_0 \right) g_3(t) dt \right. \\
&\quad - \frac{20i}{|\theta|^7} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \Re(\bar{\theta}u(t)) g_3(t) dt \\
&\quad - \frac{20}{|\theta|^7} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} g_3(t)^2 dt + \frac{4}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} g_4(t) dt \\
&\quad - \frac{8i}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa'(t)} (3c_1(t) - \pi_0) dt + \frac{12i}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa'(t)} \Re(\bar{\theta}u(t)) dt \\
&\quad \left. + \frac{16}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa'(t)} g_3(t) dt + \frac{4}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda'(t) \overline{\kappa'(t)} dt \right] + O(\hbar^{5/2})
\end{aligned}$$

En utilisant l'identité

$$\frac{\int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} \langle \tilde{\varphi}_1(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_1(t, \hbar, x) \rangle ds dt}{\int_0^{\tau(E_0)} \kappa(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\lambda(t+s)} \langle \tilde{\varphi}_1(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_1(t, \hbar, x) \rangle ds dt}$$

on voit qu'on a même

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \int_0^{\tau(E_0)} \overline{\kappa(t+s)} \langle \tilde{\varphi}_1(t+s, \hbar, x), \tilde{\varphi}_1(t, \hbar, x) \rangle ds dt \\
&= -\sqrt{\pi} \hbar^{3/2} \times \left[\frac{4}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \left[\pi_0 (6c_1(t) - \pi_0) + 3 \left(\Re c_2(t) - \frac{15}{4} c_1(t)^2 \right) \right] dt \right. \\
&\quad - \frac{1}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \left[3|u(t)|^2 + 4\Re(\bar{\theta}v(t)) - 12\Re(\bar{\theta}u(t)) \left(\frac{5}{2} c_1(t) - \pi_0 \right) \right. \\
&\quad \left. \left. + 6\Re(i\theta u'(t)) \right] dt + \frac{20}{|\theta|^7} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} g_3(t)^2 dt - \frac{4}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} \Re g_4(t) dt \right. \\
&\quad + \frac{4i}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \left[\lambda(t) \overline{\kappa'(t)} - \lambda'(t) \overline{\kappa(t)} \right] (3c_1(t) - \pi_0) dt \\
&\quad - \frac{6i}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \left[\lambda(t) \overline{\kappa'(t)} - \lambda'(t) \overline{\kappa(t)} \right] \Re(\bar{\theta}u(t)) dt \\
&\quad \left. + \frac{16}{|\theta|^5} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda(t) \overline{\kappa(t)} g_3'(t) dt - \frac{4}{|\theta|^3} \int_0^{\tau(E_0)} \lambda'(t) \overline{\kappa'(t)} dt \right] + O(\hbar^{5/2})
\end{aligned}$$

□