Construction BKW pour l'opérateur de Dirac. Cas d'un potentiel périodique.

Abderemane Mohamed
Dpt de Mathématiques
URA 758 du CNRS
2, r. de la Houssinière
44072 NANTES Cédex 03
mohamed@math.univ-nantes.fr

Bernard Parisse
Institut Fourier
UMR 5582
BP74X
38402 St Martin d'Hères Cédex
Bernard.Parisse@ujf-grenoble.fr

19 Fvrier 1997

Résumé

Dans la première partie de ce travail, nous calculons de façon explicite le symbole principal d'une solution BKW de l'opérateur de Dirac issue d'un puits ponctuel non dégénéré le long d'une géodésique planaire de la distance d'Agmon. Dans la deuxième partie, nous appliquons ce résultat à l'étude de certaines bandes du spectre de l'opérateur de Dirac avec potentiel périodique, nous montrons en particulier que la multiplicité des bandes n'est pas génériquement double.

1 Introduction.

Dans un précédent travail ([2]), nous avons étudié en limite semi-classique la première bande du spectre de l'opérateur de Dirac

$$D(h) = h\sum_{j=1}^{3} \alpha_j D_j + \alpha_4 + V(x)$$

avec un potentiel périodique $V(x)$ admettant un unique minimum non dégénéré par cellule de périodicité. Nous avions alors montré que cette bande était de taille exponentiellement petite, comme dans le cas de l'opérateur de Schrödinger.

Une des spécificités de l'opérateur de Dirac en dimension 3 est l'existence d'un opérateur antilinéaire (l'opérateur de Kramers) qui commute avec l'opérateur de Dirac lorsque le champ magnétique est nul, ce qui entraine que les valeurs propres sont de multiplicité paire (dans la théorie non relativiste, on rend compte du phénomène en définissant le "spin" de l'électron et en ajoutant un terme d'interaction du spin avec le champ magnétique). La question naturelle qui se pose dans le cas d'une bande du spectre continu est donc la multiplicité de valeurs propres de Floquet qui parcourent cette bande.

Dans [2], nous avons montré qu'à chaque valeur propre double $E_n(h)$ du problème à un puits (i.e. l'opérateur obtenu en "bouchant" convenablement tous les puits du potentiel sauf un) correspondent deux valeurs propres de l'opérateur de Floquet, dont on peut calculer le développement asymptotique (*cf. infra*):

$$E_n^{\pm}(\theta) = E_n(h) + e^{-S/h} h^2 a(h) \cos(\gamma.\theta \pm \varphi(h)) + O\left(h^{\infty} e^{-S/h}\right)$$

où:

- S est la distance d'Agmon entre deux puits voisins,
- $a(h)$ est un symbole semi-classique tel que $a(0) \neq 0$,

- γ est le vecteur reliant les deux puits les plus proches au sens de la distance d'Agmon,
- $\varphi(0)$ est la phase de Berry d'un sous-fibré de rang deux du fibré trivial de fibre $\mathbb{C}^4$ au-dessus de la trajectoire.

On aboutit alors à la conclusion suivante: lorsque le paramètre de Floquet varie, les deux valeurs propres correspondant à une même valeur propre double sont distinctes, elles parcourent le même intervalle mais sont déphasées de $2\varphi(h)$.

On démontre ce résultat en construisant des approximations BKW des fonctions propres de l'opérateur de Floquet et on détermine ainsi $a(h)$ et $\varphi(h)$. On prouve ainsi que $a(h)$ est un symbole elliptique. Dans [2], nous n'arrivions pas à contruire un exemple de potentiel tel que φ ne soit pas un multiple de 2π pour tout h assez petit. La question (posée par B. Helffer) de savoir si *semi-classiquement* les valeurs propres étaient ou non doubles n'était pas résolue.

Ici nous montrons que l'on peut calculer de manière très explicite le symbole principal du développement BKW d'un quasi-mode le long d'une géodésique d'Agmon *planaire*, ce calcul fait l'objet de la section 2. Lorsque la géodésique γ reliant les deux puits les plus voisins est planaire, nous donnons à la section 5 un calcul explicite de la phase $\varphi(0)$, plus précisément nous montrons que:

$$\varphi(0) = \int_\gamma \frac{1+V}{2V} \rho \; ds$$

où ρ désigne la courbure euclidienne de la géodésique, V le potentiel et ds l'élément de longueur euclidienne. En particulier, si la géodésique minimale est rectiligne, $\varphi(0) = 0$.

Pour répondre à la question de la multiplicité des valeurs propres, il suffit alors de construire un potentiel V tel que la géodésique minimale reliant deux puits soit planaire et tel que $\varphi(0)$ ne soit pas un multiple de π. Ici, il faut insister sur le fait que des exemples à variables séparées ne peuvent convenir, car ils donnent lieu à des géodésiques minimales rectilignes ($\rho = 0$ donc $\varphi(0) = 0$).

Nous avons d'abord cherché à construire un potentiel dont la géodésique γ soit convexe, ce qui assurerait que la fonction à intégrer garde un signe constant (puisque le terme $(1+V)/2V$ est positif: nous rappellerons plus loin qu'un puits ponctuel de l'opérateur de Dirac d'énergie nulle est un point où le potentiel vaut -1 dans des unités convenables, le décalage de 1 est l'énergie de masse de la particule). Malheureusement, bien qu'intuitivement on imagine très bien l'existence de tels potentiels, nous n'avons pas réussi à en construire. Nous nous sommes donc attachés à montrer la non-nullité générique *globale* de l'intégrale, c'est l'objet du théorème 7 que l'on montre en plusieurs étapes:

- on construit d'abord un potentiel V analytique dont une géodésique minimale γ est planaire mais non rectiligne,
- on construit ensuite un potentiel C^∞ $\tilde{V}$ dont les géodésiques issues du puits O ont le même support géométrique que celles de V, et tel que la phase $\varphi_{\tilde{V}}(0)$ correspondante ne soit pas un multiple de π.
- on montre que les géodésiques reliant O au puits le plus proche sont isolées (par le théorème des zéros isolés), ce qui permet, en modifiant éventuellement le potentiel, de se ramener à une géodésique minimale unique.

Les résultats obtenus dans la section 3 ne sont pas spécifiques à l'opérateur de Dirac, par exemple le lemme 8 s'applique aussi à l'opérateur de Schrödinger

Enfin, la dernière section de cet article est consacrée à une autre application de la construction BKW le long d'une géodésique planaire: il s'agit d'une petite amélioration du résultat du deuxième auteur ([4]) sur l'étude de l'effet d'Aharonov-Bohm sur un état borné de l'opérateur de Dirac.

2 Rappels sur la construction BKW. Étude du cas sans torsion.

On considère dans ce travail l'opérateur de Dirac défini dans $L^2(\mathbb{R}^3;\mathbb{C}^4)$ par:

$$D_V(h) = h\sum_{k=1}^{3} \alpha_k D_k + \alpha_4 + V(x).I_4 \tag{1}$$

où les matrices α_j sont des matrices 4×4:

$$(\alpha_j) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, (j = 1, 2, 3), \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \text{ où} \tag{2}$$
$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ici V est un potentiel $C^\infty(I\!R^3, I\!R)$ admettant un extrêmum non dégénéré en un point P que l'on prendra comme origine, i.e.:

- $V(0) = \pm 1$,
- $V'(0) = 0$,
- $\pm V''(0) << 0$,
- $\limsup_{|x| \leftarrow \infty} |V(x)| < 1$.

X.P. Wang a montré dans [5] que pour C fixé, l'intervalle $\mp[0, Ch]$ contient un nombre fini de valeurs propres de l'opérateur de Dirac pour h assez petit, ces valeurs propres sont doubles et en bijection avec les valeurs propres de l'oscillateur harmonique $-\Delta + \frac{1}{2}V''(0)x.x$:

$$\{E_{n,1} = \frac{\sum_{j=1}^{3} \lambda_j(2n_j + 1)}{2V(0)}, \ n \in I\!N^3\}$$

telles que $E_{n,1} \in \mp[0, C]$. Ici $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ désignent les valeurs propres de la hessienne de la distance d'Agmon d à l'origine, d est donnée par l'équation éïconale $|\nabla d|^2 = 1 - V^2$.

Dans cette section, nous nous intéressons aux fonctions propres, correspondant à des valeurs propres situées dans l'intervalle $\mp[0, Ch]$, une telle valeur propre $E_n(h)$ $(n \in I\!N^3)$ est donnée par un développement asymptotique semi-classique, au sens que des puissances demi-entières de h peuvent apparaître:

$$E_n(h) \sim h \frac{\sum_{j=1}^{3} \lambda_j(2n_j + 1)}{2V(0)} + \sum_{2 \leq k / 2k \in I\!N} h^k E_{n,k}, \tag{3}$$

(dans [2], on a traité uniquement le cas $n = (0, 0, 0)$).

Nous allons calculer le symbole principal de la fonction propre le long d'une géodésique de la distance d'Agmon issue de l'origine d'abord en toute généralité, puis lorsqu'elle reste dans un plan. Ceci permettra de préciser des développements asymptotiques dans des phénomènes faisant intervenir l'effet tunnel, par exemple lorsqu'on dispose de symétries.

2.1 Le cas général.

On considère donc le symbole principal w_0 d'une fonction propre:

$$\varphi_h(x) \sim h^{-(3+|n|)/4} \left(\sum_{k=0}^{\infty} w_k(x) h^k \right) e^{-d(x)/h} \tag{4}$$

associée à $E_n(h)$. On écrit l'équation:

$$(D_V - E_n(h))\varphi_h = O(h^\infty) e^{-d(x)/h}$$

et on décompose en puissances croissantes de h (*cf.* [5] et [3, p. 1099] pour plus de détails). La première puissance de h donne:

$$(i\nabla_\alpha d + \alpha_4 + V(x).I_4) w_0 = 0, \quad \text{où } \nabla_\alpha = \sum_{j=1}^{3} \alpha_j \partial_j \tag{5}$$

ce qui entraîne que 0 est valeur propre de la matrice $i\nabla_\alpha d + \alpha_4 + V(x).I_4$, condition qui se traduit par l'équation éïconale:

$$|\nabla d|^2 = 1 - V^2.$$

En d'autres termes, d est la distance d'Agmon associée à la métrique $(1 - V^2)dx^2$. La deuxième puissance de h donne l'équation de transport:

$$(2VE_{n,1} + \frac{1}{i}\nabla_\alpha V + \Delta d + 2\sqrt{1 - V^2}\partial_s)w_0(x(s)) = 0. \tag{6}$$

où s désigne l'abscisse curviligne euclidienne le long de la géodésique d'Agmon. On retrouve ici le premier terme du développement asymptotique de $E_n(h)$ dans (3) en faisant $s = 0$. Si on note $d_j = \partial_j d$, on a:

$$\sqrt{1 - V^2}\partial_s = \sum_{j=1}^{3} d_j \partial_j. \tag{7}$$

Rappelons que le comportement de $w_0(x)$ au voisinage de l'origine est:

$$w_0(x(s)) \sim_{s\to 0} Cx(s)^n, \quad C \in \mathbb{C}^4 \tag{8}$$

où $x(s)^n = x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3}$ dans des coordonnées qui diagonalisent $V''(0)$.

On commence par traiter la partie non différentielle scalaire. On est naturellement amené à faire le changement de variable:

$$w_0(x(s)) = \exp\left(-\int_{[x(0),x(s)]} \frac{2VE_{n,1} + \Delta d}{2\sqrt{1 - V^2}}(u)du\right) y(x(s)), \tag{9}$$

la fonction vectorielle y doit alors satisfaire l'équation:

$$2\sqrt{1 - V^2}\partial_s y = -\frac{1}{i}\nabla_\alpha V y \tag{10}$$

Ce changement de variables n'est pas valide lorsque $n \neq (0, 0, 0)$ car l'intégrale de (9) diverge. On peut néanmoins contrôler cette divergence. On fixe t (t est censé être petit devant s) et on pose:

$$w_0(x(s)) = x(t)^n \exp\left(-\int_{[x(t),x(s)]} \frac{2VE_{n,1} + \Delta d}{2\sqrt{1 - V^2}}(u)du\right) y(x(s)), \tag{11}$$

on ajoute ici le coefficient constant (par rapport à s) $x(t)^n$ ce qui permet de faire tendre t vers 0. En effet, si on considère la fonction:

$$\varphi(t) = x(t)^n \exp\left(-\int_{[x(t),x(s)]} \frac{2VE_{n,1} + \Delta d}{2\sqrt{1 - V^2}}(u)du\right)$$

on observe que:

$$\begin{aligned} \partial_t \varphi(t) &= \left[-\frac{2VE_{n,1} + \Delta d}{2\sqrt{1 - V^2}} + \frac{\sum_{j=1}^{3} d_j n_j}{\sqrt{1 - V^2}}\right]\varphi \\ &= O(1)\varphi \end{aligned}$$

La fonction y satisfait toujours à l'équation (10). Enfin, lorsque t tend vers 0, les remarques précédentes montrent que $y(0)$ tend vers la constante C de (8).

On peut résumer les résultats obtenus par la:

Proposition 1 *Le symbole principal de la solution BKW d'énergie $E_n(h)$ le long d'une géodésique d'Agmon issue d'un puits ponctuel non dégénéré, paramétré par l'abscisse curviligne euclidienne s est donné par:*

$$w_0(x(s)) = \lim_{t\to 0} x(t)^n \exp\left(-\int_{u=t}^{u=s} \frac{2VE_{n,1} + \Delta d}{2\sqrt{1 - V^2}}(u)\ du\right) y(s), \tag{12}$$

où y satisfait l'équation:

$$2\sqrt{1 - V^2}\partial_s y = -\frac{1}{i}\nabla_\alpha V y, \quad (i\nabla_x d + \alpha_4 + V(x).I_4)y = 0 \tag{13}$$

(Lorsque $n = (0, 0, 0)$, on peut prendre $t = 0$).

2.2 Isomorphisme associé à une géodésique reliant deux puits.

Revenons à (13). On remarque tout d'abord que y est de norme constante. De plus y est une section du sous-fibré vectoriel de rang 2, dont la base est la géodésique d'Agmon γ et dont la fibre est $\mathrm{Ker}(i\nabla_x d + \alpha_4 + V(x).I_4) \subset \mathbb{C}^4$.

Considérons maintenant une géodésique d'Agmon reliant 2 puits. La fibre étant identique au départ et à l'arrivée, il est naturel de comparer y aux deux puits. En fait on verra que le produit scalaire en un point de la géodésique de deux solutions BKW issues de ces deux puits fait justement intervenir la variation d'une solution y d'un puits à l'autre (*cf.* lemme 11).

On se donne donc deux puits non dégénérés $P^{\rightarrow}$ et $P^{\leftarrow}$ de même nature reliés par une géodésique γ pour la distance d'Agmon associée au potentiel V.

Définition 2 *On définit l'endomorphisme de translation φ sur $Ker\alpha_4 + V(P^{\rightarrow}).I_4$ par:*

$$\varphi(y_0) = y(P^{\leftarrow})$$

où $y(x)$ est la solution de (13) telle que:

$$y(P^{\rightarrow}) = y_0$$

Il s'agit bien évidemment d'une application linéaire, qui est d'ailleurs unitaire. De plus, cet endomorphisme possède une propriété de symétrie supplémentaire: il commute avec l'opérateur antilinéaire de Kramers. Ce dernier est défini sur $\mathbb{C}^4$ par:

$$Ku = \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \overline{u}$$

et s'étend de manière évidente à $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. L'égalité $K\varphi = \varphi K$ vient du fait que K commute avec l'opérateur de Dirac.

Soit donc λ une valeur propre de φ et u un vecteur propre associé. Alors Ku est aussi un vecteur propre associé à $\overline{\lambda}$. Comme $(Ku|u) = 0$, φ est diagonalisable de valeurs propres λ et $\overline{\lambda}$, chacune de multiplicité 1 (ou λ de multiplicité 2 si λ est réel). Comme $|\lambda| = 1$ puisque φ est unitaire, on associe naturellement à φ l'argument de λ, c'est en quelque sorte la phase de Berry de la géodésique.

Définition 3 *La phase d'une géodésique d'Agmon reliant deux puits est définie au signe près par:*

$$\pm\phi = \arg\lambda$$

où λ est une des valeurs propres de l'endomorphisme de translation.

2.3 Décomposition sur $\mathbb{C}^2 \oplus \mathbb{C}^2$.

L'obstacle principal à une résolution explicite de (13) est la présence d'un terme non scalaire $\frac{1}{i}\nabla_\alpha V$. Décomposons $\mathbb{C}^4$ en $\mathbb{C}^2 \oplus \mathbb{C}^2$ en posant $y = (y_1, y_2)$ avec $y_1, y_2 \in \mathbb{C}^2$. On suppose maintenant que $V(P) = -1$ (ce qui correspond à un puits de type particule alors que $V(P) = +1$ correspond à un puits d'antiparticule). L'équation (5) est alors équivalente pour $V(x) \neq 1$ à:

$$y_2 = \frac{i\nabla_\sigma d}{1-V} y_1, \quad \text{où } \nabla_\sigma = \sum_{j=1}^{3} \sigma_j \partial_j \tag{14}$$

Lorsqu'on a affaire à un puits d'antiparticule, on peut reprendre la même construction en échangeant le rôle de y_1 et y_2.

En remplaçant dans (13), on a:

$$2\sqrt{1-V^2}\partial_s y_1 = \frac{-1}{1-V}(\nabla_\sigma V)(\nabla_\sigma d) y_1. \tag{15}$$

On utilise alors l'identité $\sigma_1\sigma_2 = -i\sigma_3$ qui permet d'écrire (15) sous la forme:

$$2\sqrt{1-V^2}\partial_s y_1 = \frac{1}{V-1}(\nabla V.\nabla d - i(\nabla V \times \nabla d)_\sigma) y_1, \tag{16}$$

où $(\nabla V \times \nabla d)_\sigma$ désigne le produit vectoriel des vecteurs ∇V et ∇d exprimé dans la base $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$.

Remarque 4 *On observe en appliquant (14) que:*

$$||y_1||^2(s) = \frac{1-V}{2}||y_1||^2(0), \quad ||y_2||^2(s) = \frac{1+V}{2}||y_1||^2(0)$$

Pour poursuivre la résolution explicite de (16), il faut maintenant supposer que la géodésique est planaire.

2.4 Cas particulier d'une géodésique planaire.

Cette hypothèse permet de dire que ∇V et ∇d restent dans un même plan (celui de la géodésique). En effet, si on note t_α et n_α les vecteurs tangent et normaux à la géodésique d'Agmon (exprimés dans la base $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$), on a:

$$\nabla_\alpha d = \sqrt{1-V^2}\; t_\alpha. \tag{17}$$

En écrivant l'équation d'une géodésique pour la métrique $(1-V^2)dx^2$, on montre:

$$\nabla_\alpha (1-V^2) = 2(1-V^2)\rho(s) n_\alpha(s) - 2V(\partial_s V) t_\alpha \tag{18}$$

où ρ désigne la courbure de la géodésique. Finalement:

$$\nabla_\alpha V = \partial_s V\, t_\alpha - \frac{1-V^2}{V}\rho\, n_\alpha. \tag{19}$$

Supposons maintenant que la géodésique est planaire et soit σ_n le vecteur normal au plan de la géodésique, exprimé dans la base $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$. On peut alors déterminer y_1 en intégrant (16):

$$y_1(s) = \exp\left(\int_0^s \frac{\nabla V.\nabla d}{2(V-1)\sqrt{1-V^2}}(u)\; du - i\sigma_n \int_0^s \frac{(\nabla V \times \nabla d)_n}{2(V-1)\sqrt{1-V^2}}\; du\right) y_1(0). \tag{20}$$

La partie scalaire de l'intégrale apparaissant dans (20) vaut d'après (17) et (19):

$$\int_0^s \frac{\partial_u V}{2(V-1)}\; du = \frac{1}{2}\ln(1-V)(s) - \frac{1}{2}\ln 2.$$

La partie non scalaire est:

$$-i\sigma_n \int_0^s \frac{1-V^2}{2V(V-1)}\rho\; du$$

Donc:

$$y_1(t) = \sqrt{\frac{1-V(t)}{2}} \exp\left(i\sigma_n \int_0^s \frac{1+V}{2V}\rho\; du\right) y_1(0), \tag{21}$$

ce qui permet de déterminer $y(s)$ à l'aide de (14) puis $w(x(t))$ à l'aide de (11). D'où le:

Théorème 5 *Le symbole principal de la solution BKW d'énergie $E_n(h)$ (de développement asymtotique donné en (3)) le long d'une géodésique planaire γ, issue d'un puits de type particule, paramétrée par l'abscisse curviligne euclidienne s, est donné par:*

$$w_0(x(s)) = \lim_{t\to 0} x(t)^n \exp\left(-\int_{u=t}^{u=s} \frac{2VE_{n,1} + \Delta d}{2\sqrt{1-V^2}}(u)\; du\right) \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1-V(t)}{2}} \exp\left(i\sigma_n \int_0^s \frac{1+V}{2V}\rho\; du\right) y_1(0) \\ \frac{i\nabla_\sigma d}{1-V}\sqrt{\frac{1-V(t)}{2}} \exp\left(i\sigma_n \int_0^s \frac{1+V}{2V}\rho\; du\right) y_1(0) \end{pmatrix} \tag{22}$$

où $w_0(x(s)) \sim_{s\to 0} x(s)^n (y_1(0), 0)$. Lorsque $n = (0,0,0)$, on peut enlever la limite dans (22).

En appliquant le théorème 5, on peut maintenant calculer la "phase de Berry" (*cf.* la définition 3) de la géodésique:

Théorème 6 *Soit $P^{\rightarrow}$ et $P^{\leftarrow}$ deux puits ponctuels non dégénérés symétriques (i.e. ayant les mêmes niveaux d'énergie $E_n(h)$). Alors la phase associée à la géodésique planaire γ de longueur euclidienne s reliant $P^{\rightarrow}$ et $P^{\leftarrow}$ est donnés par:*

$$\phi = \pm \int_0^s \frac{1+V}{2V}\rho\; du \tag{23}$$

3 L'isomorphisme associé à une géodésique n'est génériquement pas trivial.

En vue des sections suivantes, nous allons montrer que la phase d'une géodésique d'Agmon reliant deux puits n'est pas génériquement un multiple de π.

On peut d'abord se ramener à la dimension 2 en posant par exemple:

$$1 - V^2(x_1, x_2, x_3) = \varepsilon(1 - V^2(x_1, x_2)) + \frac{1}{2}(1 - \cos \omega x_3)$$

où on ajuste ω en fonction du réseau Γ et où on choisit ε assez petit pour que le plus proche voisin de l'origine sur Γ au sens de la distance d'Agmon ait sa troisième composante nulle.

Nous allons montrer le:

Théorème 7 *On peut construire un potentiel W défini sur $\mathbb{R}^2$ tel que:*

1. *W soit périodique sur un réseau de $\mathbb{R}^2$ et admette un unique puits non dégénéré par cellule de périodicité,*
2. *W soit analytique réel (sauf éventuellement sur le réseau formé par les puits où la métrique s'annule)*
3. *les géodésique minimales d'Agmon reliant deux puits P et P' de W soient isolées et non rectilignes.*

Soit γ une des géodésiques minimales reliant deux puits P à P'. Il existe alors une infinité de potentiels de classe C^∞ V admettant γ comme géodésique minimale d'Agmon tels que:

$$\int_0^s \frac{1+V}{2V}\rho \; du \neq 0[\pi] \tag{24}$$

3.1 Première étape.

Construction d'un potentiel analytique périodique dont les géodésiques minimales sont non rectilignes.

Soient $\varepsilon > 0$ et $\nu > 0$ fixés, on peut alors choisir μ (assez petit) tel que le potentiel $W < 0$ défini par:

$$1 - W^2 = \mu \times \left((1 - \cos x \cos y)(1 + \sqrt{1 - \cos x \cos y + \varepsilon(1 - \cos x)})^2 + \varepsilon(1 - \cos x) + \nu(1 - \cos y)\right)$$

soit réel analytique (sauf aux points $(x, y) = (0, 0) \bmod 2\pi$). Le potentiel W est périodique en x et en y de période 2π, le minimum sur une cellule de périodicité est atteint en l'unique point $(0, 0)$ modulo 2π. Nous allons voir que les horizontales, verticales reliant deux puits ne peuvent être des géodésiques minimales pour la distance d'Agmon lorsque ε et ν sont assez petits. Pour cela, on calcule la longueur d'Agmon des horizontales et verticales lorsque $\varepsilon = \nu = 0$. Ces deux longueurs sont égales et valent:

$$2 \int_0^\pi \sqrt{\mu(1 - \cos x)(1 + \sqrt{1 - \cos x})^2} \; dx = 2\sqrt{\mu} \int_0^\pi \sqrt{2} \sin \frac{x}{2}(1 + \sqrt{2} \sin \frac{x}{2}) \; dx = 2\sqrt{\mu}(2\sqrt{2} + \pi)$$

La longueur d'Agmon de la diagonale reliant $(0, 0)$ à $(2\pi, 2\pi)$ vaut:

$$2 \int_0^\pi \sqrt{\mu(1 - \cos^2 x)(1 + \sqrt{1 - \cos^2 x})^2} \; \sqrt{2}dx = 2\sqrt{\mu} \int_0^\pi \sin x(1 + \sin x) \; \sqrt{2}dx = 2\sqrt{\mu}(2\sqrt{2} + \frac{\sqrt{2}}{2}\pi)$$

et est donc inférieure à la longueur des horizontales et verticales. Nous en déduisons que la géodésique minimale d'Agmon entre les puits les plus proches n'est pas une horizontale ni une verticale pour ε et ν assez petits.

D'autre part, si on fait le développement de Taylor de W à l'ordre 2, on voit que $W''(0)$ est une matrice diagonale dont les coefficients diagonaux sont distincts sauf sur une courbe de l'espace des paramètres (ε, ν). En dehors de cette courbe, une diagonale ne peut donc pas être une géodésique minimale (la tangente en un puits d'une géodésique est alors soit une horizontale soit une verticale). Donc la géodésique minimale n'est ni une horizontale, ni une verticale ni une diagonale, elle n'est donc pas rectiligne.

3.2 Deuxième étape:

Les géodésiques minimales d'un potentiel analytique périodique sont isolées.

On a en fait un résultat un peu plus général pour un potentiel analytique non forcément périodique:

Lemme 8 *Soit W un potentiel analytique sur $\mathbb{R}^2$ et P, P' deux puits ponctuels non dégénérés de V. Alors, les géodésiques issues de P passent toutes par P' ou sont isolées.*

Preuve du lemme 8:

Considérons les sphères d'Agmon S_P et $S_{P'}$ de centres P et P' et de rayon $\varepsilon > 0$. On choisit ε tel que la distance d'Agmon de x à P [respectivement P'] soit analytique à l'intérieur des sphères.

Soit $x \in S_P$, il existe une unique géodésique (minimale) γ_x reliant P et x. On paramètre γ_x pour en faire la solution d'énergie 0 du hamiltonien $\frac{1}{2}\xi^2 + W^2 - 1$ passant par x à l'instant $t = 0$. On pose alors $\xi(x,t) = \frac{d}{dt}\gamma_x = \nabla_x d(x,P)$. On observe que $\gamma_x(t)$ est analytique par rapport à x et à t.

Soit maintenant $x_0 \in S_P$ tel que la géodésique correspondante relie P à P'. Notons $\gamma_{x_0}(t_0)$ l'intersection de $S_{P'}$ avec la géodésique. Soit x un point voisin de x_0, l'équation de l'intersection de $\gamma_x(t)$ et de $S_{P'}$ (si elle existe) est:

$$d(\gamma_x(t), P') - \varepsilon = 0$$

On applique le théorème des fonctions implicites en x_0, t_0, il s'agit de déterminer t en fonction de x. On a:

$$\frac{d}{dt}d(\gamma_x(t), P') = \partial_x d(\gamma_{x_0}(t_0), P').\frac{d\gamma_x}{dt}(t_0) = |\nabla_x d|^2 = 1 - V^2 \neq 0$$

(uniformément). Donc il existe un voisinage de x_0 tel que la géodésique issues de P et passant par x rencontre $S_{P'}$ à l'instant $t(x)$ où $x \to t(x)$ est une fonction analytique de x. La géodésique aboutit alors en P' si et seulement si:

$$\frac{d}{dt}\gamma_x(t(x)) = -\nabla d(.,P')_{|\ \gamma_x(t(x))} \tag{25}$$

qui est une condition analytique par rapport à x.

Ainsi, le théorème des zéros isolés permet d'affirmer que soit toutes les géodésiques issues de P aboutissent à P', soit elles sont isolées.

QED

Si on suppose de plus que V est périodique, les géodésiques sont forcément isolées. En effet, il existe une géodésique issue de P qui ne passe pas par P': il suffit de prendre γ translatée de $P - P'$.

3.3 Troisième étape

Nous avons montré l'existence de potentiels W satisfaisant les hypothèses du théorème 7. Pour continuer la preuve du théorème, nous allons modifier le potentiel W en gardant γ comme géodésique reliant les deux puits, on montrera que l'on peut ainsi rendre l'intégrale de (24) non multiple de π. Il reste alors à modifier W près des éventuelles autres géodésiques minimales de W pour que γ soit l'unique géodésique minimale de V reliant les deux puits.

On va utiliser des coordonnées de Gauß:

Lemme 9 *Soit W un potentiel analytique périodique de période le réseau Γ tel que $|W(x)| \leq 1$ avec égalité sur Γ. Soit γ une géodésique minimale d'Agmon pour W reliant deux points voisins P et P' de Γ. Soit $\varepsilon > 0$ fixé.*

Il existe un potentiel V périodique sur Γ tel que:

- *$|V| \leq 1$ avec égalité sur Γ,*
- *V est C^∞,*
- *Les géodésiques issues de P pour les métriques d'Agmon induites par W et V sont identiques,*
- *l'intégrale $\int \frac{1+V}{V}\rho ds$ de (24) n'est pas un multiple de π.*

Preuve:
Soit f une fonction de $C^\infty(I\!R^2,]0,1])$ périodique sur Γ, on pose:

$$1 - V(x)^2 = f(x)^2(1 - W(x)^2)$$

On paramètre γ de telle sorte que

$$\gamma(t) = \pi_x(x(t), \xi(t))$$

soit solution d'énergie nulle des équations de Hamilton pour $H = \frac{1}{2}\xi^2 + W^2 - 1$:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} & = & \xi \\ \frac{d\xi}{dt} & = & \nabla_x(1 - W^2) \end{cases}$$

Soit $t \to s(t)$ défini par:

$$\frac{dt}{ds} = f(x(t))$$

Si on paramètre γ par s, on a:

$$\frac{dx}{ds} = \frac{dx}{dt}\frac{dt}{ds} = f(x)\xi$$

On pose donc:

$$\tilde{\xi}(s) = f(x)\xi(s)$$

On a alors:

$$\frac{1}{2}\tilde{\xi}^2 = \frac{1}{2}f^2\xi^2 = f^2(1 - W^2) = (1 - V^2)$$

Regardons la deuxième équation canonique que l'on doit vérifier pour que $\gamma(s)$ soit géodésique d'Agmon pour le potentiel V:

$$\frac{d}{ds}\tilde{\xi} = \nabla_x(1 - V^2) \tag{26}$$

On a:

$$\begin{array}{rcl} \frac{d}{ds}\tilde{\xi} & = & \frac{d}{ds}(f(x)\xi) \\ & = & \frac{d}{ds}(f(x))\xi + f(x)\frac{d\xi}{ds} \\ & = & \frac{d}{ds}(f(x))\xi + f^2\frac{d\xi}{dt} \end{array}$$

D'autre part:

$$\begin{array}{rcl} \nabla_x(1 - V^2) = \nabla_x(f^2(1 - W^2)) & = & \nabla_x(f^2)(1 - W^2) + f^2\nabla_x(1 - W^2) \\ & = & \frac{1}{2}\nabla_x(f^2)\xi^2 + f^2\frac{d}{dt}\xi \end{array}$$

Le long de γ, l'équation (26) équivaut donc à:

$$\frac{df}{ds}\xi = f\nabla_x(f)\xi^2 \tag{27}$$

L'équation (27) entraine:

$$\nabla_x f \quad // \quad \xi$$

le long de γ. Réciproquement si $\nabla_x f$ est parallèle à ξ, alors en faisant le produit scalaire de (27) avec ξ on obtient:

$$\frac{df}{ds} = f\xi.\nabla_x f$$

soit:

$$\frac{df}{ds} = \frac{dx}{ds}.\nabla_x f$$

qui est clairement vérifiée.

Donc γ est une géodésique pour la distance d'Agmon associée à W si et seulement si $\nabla_x f$ est tangent à γ le long de γ .

On observe maintenant que la distance d'Agmon $d(x,P)$ de x au puits P (pour W) est une fonction dont le gradient est tangent aux géodésiques d'Agmon issues de P. Soit $\mathcal{V}$ un voisinage du puits P sur lequel $d(x,P)$ est C^∞ (analytique en fait), on prendra pour $\mathcal{V}$ une boule de rayon ε pour la distance d'Agmon induite par W. Soit alors g une fonction de $C^\infty(\mathbb{R}^+,]0,1])$ telle que:

$$g(0) = 1, \quad g(\theta) = 1 \quad \text{si } \theta \geq \varepsilon.$$

Si on pose:

$$f(x) = g(d(x,P))$$

sur $\mathcal{V}$, alors f se prolonge en une fonction C^∞ et périodique dont le gradient est parallèle aux géodésiques issues de P. On remarque que les géodésiques d'Agmon pour V et W issues de P sont identiques. Comme γ est minimale pour W, elle le reste pour V. En effet, la V-longueur d'Agmon d'une géodésique issue de P de W-longueur d'Agmon l est:

$$\int_0^\varepsilon g(\theta)\ d\theta + l - \varepsilon$$

L'ensemble des géodésiques minimales n'est donc pas modifié.

Montrons qu'on peut choisir g pour que l'intégrale de (24) ne soit pas un multiple de π. On note L la longueur euclidienne de γ de sorte que l'intégrale de (24) s'écrit pour W

$$\int_0^L \frac{1+W}{W} \rho\ ds \tag{28}$$

et devient pour V :

$$\int_0^L \frac{1+V}{V} \rho\ ds \tag{29}$$

puisque le support géométrique de la géodésique reste identique. Rappelons que:

$$1 - V^2 = f^2(1 - W^2), \quad V(P) = W(P) = -1$$

On en déduit les inégalités suivantes dans un voisinage du puits P:

$$0 < -W \leq -V < 1, \quad 0 < 1 + V \leq 1 + W, \quad 0 < \frac{1+V}{-V} \leq \frac{1+W}{-W}, \quad 0 > \frac{1+V}{V} \geq \frac{1+W}{W} \tag{30}$$

avec égalité si et seulement si $f = 1$. Comme la courbure ρ est non plate au puits, il existe $\eta > 0$ (assez petit) tel que ρ garde un signe constant sur l'intervalle $]0, \eta[$, pour fixer les idées on supposera que $\rho > 0$. Quitte à diminuer ε ou η, on peut aussi supposer que $\varepsilon = \eta$. On a alors:

$$\int_0^\varepsilon \frac{1+V}{V} \rho\ ds - \int_0^\varepsilon \frac{1+W}{W} \rho\ ds > 0$$

avec égalité si et seulement si $g \equiv 1$ sur $[0, \varepsilon]$. Comme $g = 1$ en-dehors de l'intervalle $[0, \varepsilon]$, on a:

$$\int_0^L \frac{1+V}{V} \rho\ ds - \int_0^L \frac{1+W}{W} \rho\ ds > 0$$

donc la différence entre les deux intégrales (29) et (28) est positive, et même strictement positive si g ne vaut pas identiquement 1. De plus cette différence peut être rendue aussi petite que l'on veut en choisissant une fonction g assez proche de 1. On peut donc choisir g pour que l'intégrale (29) ne soit pas un multiple de π.

3.4 Quatrième et dernière étape

La géodésique γ de V est minimale mais elle n'est pas forcément unique. On va donc modifier V pour rallonger les autres géodésiques reliant les deux points singuliers de la métrique. Comme $1-V^2$ s'annule en P, il existe $\varepsilon > 0$ tel que $1-V^2(x) < \frac{1}{2}$ si $|x-P| < 3\varepsilon$. On modifie alors V en $\tilde{V}$ près des autres géodésiques d'Agmon reliant P et P' en posant $1-\tilde{V}^2 = 1$ lorsque $d(x,P) \in [\varepsilon, 3\varepsilon]$. Ce qui a pour effet d'allonger la distance de ces géodésiques d'au moins:

$$\int_{\varepsilon}^{3\varepsilon} (1-(1-V^2))dx \geq 2\varepsilon\frac{1}{2} = \varepsilon$$

On peut maintenant assurer que notre géodésique γ est minimale pour la distance d'Agmon associée à $\tilde{V}$ et vérifie la condition (24).

4 Application au calcul de matrices d'interaction.

Il s'agit maintenant de faire le lien avec les termes qui apparaitront dans les matrices d'interaction. Typiquement, ils seront de la forme:

$$(it_\alpha a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow})$$

où $a^{\rightarrow}$ et $b^{\leftarrow}$ sont les symboles principaux de deux solutions BKW issues respectivement de $P^{\rightarrow}$ et $P^{\leftarrow}$ (on rappelle que t_α est le vecteur tangeant en un point de la géodésique d'Agmon reliant $P^{\rightarrow}$ à $P^{\leftarrow}$ exprimé dans la base de matrices 4×4 $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$).

Lemme 10 *Soient $a^{\rightarrow}$ et $b^{\leftarrow}$ deux symboles principaux de deux solutions BKW issues de deux puits $P^{\rightarrow}$ et $P^{\leftarrow}$ et soient t_α et n_α deux vecteurs respectivement tangeant (orienté de $P^{\leftarrow}$ vers $P^{\rightarrow}$) et normaux à la géodésique, alors:*

$$(it_\alpha a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow}) = -\sqrt{1-V^2}(a^{\rightarrow}|\alpha_4 b^{\leftarrow}), \quad (n_\alpha a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow}) = 0. \tag{31}$$

La preuve de ce résultat est purement calculatoire. La première égalité se prouve comme dans [4, équations (63), (64)]. On a:

$$(\alpha_4 + V + i\sqrt{1-V^2}t_\alpha)a^{\rightarrow} = 0, \quad (\alpha_4 + V - i\sqrt{1-V^2}t_\alpha)b^{\leftarrow} = 0$$

car $\nabla_\alpha d^{\leftarrow} = -\sqrt{1-V^2}t_\alpha$. De plus $\alpha_4^2 = Id$, donc:

$$b^{\leftarrow} = \frac{1}{2}\alpha_4\left(\alpha_4 - V + i\sqrt{1-V^2}t_\alpha\right)b^{\leftarrow}$$

D'où:

$$\begin{aligned}
(it_\alpha a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow}) &= \frac{1}{2}(it_\alpha a^{\rightarrow}|\alpha_4(\alpha_4 - V)b^{\leftarrow}) + \frac{1}{2}(it_\alpha a^{\rightarrow}|i\alpha_4\sqrt{1-V^2}t_\alpha b^{\leftarrow}) \\
&= \frac{1}{2}(\frac{-\alpha_4 - V}{\sqrt{1-V^2}}a^{\rightarrow}|\alpha_4(\alpha_4 - V)b^{\leftarrow}) + \frac{\sqrt{1-V^2}}{2}(t_\alpha a^{\rightarrow}|\alpha_4 t_\alpha b^{\leftarrow}) \\
&= -\frac{\sqrt{1-V^2}}{2}(a^{\rightarrow}|\alpha_4 b^{\leftarrow}) - \frac{\sqrt{1-V^2}}{2}(t_\alpha^2 a^{\rightarrow}|\alpha_4 b^{\leftarrow}) \\
&= -\sqrt{1-V^2}(a^{\rightarrow}|\alpha_4 b^{\leftarrow})
\end{aligned}$$

Passons à la deuxième égalité de (31). Comme t_α est normé et orthogonal à n_α, on a:

$$t_\alpha^2 = 1, \quad t_\alpha n_\alpha = -n_\alpha t_\alpha$$

Donc, en posant $C = \frac{-1}{i\sqrt{1-V^2}}$:

$$(n_\alpha a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow}) \quad = \quad (n_\alpha t_\alpha^2 a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow})$$

$$\begin{aligned}
&= -(n_\alpha t_\alpha a^{\rightarrow}|t_\alpha b^{\leftarrow}) \\
&= -(n_\alpha C(\alpha_4+V)a^{\rightarrow}|-C(\alpha_4+V)b^{\leftarrow}) \\
&= |C|^2((\alpha_4+V)(-\alpha_4+V)n_\alpha a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow}) \\
&= \frac{1}{1-V^2}(-1+V^2)(n_\alpha a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow}) \\
&= -(n_\alpha a^{\rightarrow}|b^{\leftarrow}) \\
&= 0
\end{aligned}$$

On décompose maintenant les symboles BKW en leur partie norme et leur partie de type y. Il s'agit donc d'estimer des produits scalaires du type:

$$(y^{\rightarrow}|\alpha_4 z^{\leftarrow})$$

où $y^{\rightarrow}$ et $z^{\leftarrow}$ sont solutions déquations de transport du type (13). Il faut remarquer que les abscisses curvilignes définies par (13) croissent en sens opposés pour $y^{\rightarrow}$ et $z^{\leftarrow}$. Si on choisit le sens croissant pour $y^{\rightarrow}$, alors:

$$2\sqrt{1-V^2}\partial_s y = -\frac{1}{i}\nabla_\alpha V y, \quad 2\sqrt{1-V^2}\partial_s z = \frac{1}{i}\nabla_\alpha V z$$

Donc:

$$\partial_s(y^{\rightarrow}(s)|\alpha_4 z^{\leftarrow}(s)) = 0$$

car α_4 anticommute avec les α_i (on utilise aussi le fait que les α_i sont hermitiennes). Il suffit donc d'estimer le produit scalaire en $P^{\leftarrow}$. En ce point, la situation est simple car α_4 vaut $\pm Id$ sur $\mathrm{Ker}(\alpha_4 + V(P^{\leftarrow}).I_4)$ et:

$$y^{\rightarrow}(P^{\leftarrow}) = \varphi(y^{\rightarrow}(P^{\rightarrow})$$

Finalement, il suffit de connaitre les solutions au puits dont elles sont issues.

Lemme 11 *Soit φ l'isomorphisme de translation associé à la géodésique reliant deux puits $P^{\rightarrow}$ et $P^{\leftarrow}$. Pour tout x sur la géodésique, on a:*

$$(y^{\rightarrow}|\alpha_4 z^{\leftarrow})(x) = (\varphi(y^{\rightarrow}(P^{\rightarrow})|z^{\leftarrow}(P^{\leftarrow}))$$

Dans le calcul de la matrice d'interaction, $z^{\leftarrow}(P^{\leftarrow})$ prendra deux valeurs: $y^{\rightarrow}(P^{\rightarrow})$ et $Ky^{\rightarrow}(P^{\rightarrow})$ qui forment une base de $\mathrm{Ker}(\alpha_4 + V(P^{\rightarrow}).I_4)$.

Théorème 12 *Soit $a^{\rightarrow}$ une solution BKW issue de $P^{\rightarrow}$ et $a^{\leftarrow}$ la solution BKW correspondante issue de $P^{\leftarrow}$, i.e. telle que:*

$$a^{\rightarrow}(P^{\rightarrow}) = a^{\leftarrow}(P^{\leftarrow}).$$

*Soit λ une des deux valeurs propres conjuguées de l'isomorphisme associé à la géodésique (*cf.* la définition 2). On a en tout point x de γ:*

$$\Re(it_\alpha a^{\rightarrow}|a^{\leftarrow})(x) = \sqrt{1-V^2}\ \Re\lambda\ |a^{\rightarrow}||a^{\leftarrow}| \tag{32}$$

$$\sqrt{\Im^2(it_\alpha a^{\rightarrow}|a^{\leftarrow}) + |(it_\alpha a^{\rightarrow}|Ka^{\leftarrow})|^2}(x) = \sqrt{1-V^2}\ |\Im\lambda|\ |a^{\rightarrow}||a^{\leftarrow}| \tag{33}$$

Remarque 13 *Le théorème 12 est valide si la géodésique reliant $P^{\rightarrow}$ et $P^{\leftarrow}$ n'est pas planaire. L'hypothèse de planarité donne de plus une formule explicite pour $\Re\lambda$ et $|\Im\lambda|$.*

Preuve

Soit $u^{\rightarrow}$ un vecteur propre normé de φ associé à λ. Il existe alors α et β tels que:

$$a^{\rightarrow} = \alpha u^{\rightarrow} + \beta K u^{\rightarrow}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = |a^{\rightarrow}|^2$$

Comme K est antilinéaire de carré $-Id$, on a alors:

$$\begin{aligned}
Ka^{\rightarrow} &= -\overline{\beta}u^{\rightarrow} + \overline{\alpha}Ku^{\rightarrow} \\
\varphi(a^{\rightarrow}) &= \lambda\alpha u^{\rightarrow} + \overline{\lambda}\beta K u^{\rightarrow} \\
\varphi(Ka^{\rightarrow}) &= -\lambda\overline{\beta}u^{\rightarrow} + \overline{\lambda}\overline{\alpha}Ku^{\rightarrow}
\end{aligned}$$

Donc, comme $\{u^{\rightharpoonup}, Ku^{\rightharpoonup}\}$ est orthonormée:

$$\begin{aligned}(a^{\rightharpoonup}|\varphi(a^{\rightharpoonup})) &= (\alpha u^{\rightharpoonup} + \beta K u^{\rightharpoonup} | \lambda\alpha u^{\rightharpoonup} + \overline{\lambda}\beta K u^{\rightharpoonup}) \\ &= \lambda|\alpha|^2 + \overline{\lambda}|\beta|^2\end{aligned}$$

et:

$$\begin{aligned}(a^{\rightharpoonup}|\varphi(Ka^{\rightharpoonup})) &= (\alpha u^{\rightharpoonup} + \beta K u^{\rightharpoonup} | -\lambda\overline{\beta} u^{\rightharpoonup} + \overline{\lambda}\overline{\alpha} K u^{\rightharpoonup}) \\ &= -2(\Im\lambda)\overline{\alpha}\overline{\beta}\end{aligned}$$

On conclut alors aisément.

5 Application à un potentiel périodique sur un réseau.

Il s'agit ici de corriger une erreur dans notre article [2] (voir l'erratum). On considère la situation suivante:

- V est un potentiel périodique sur un réseau Γ de $I\!R^3$:

$$V(x+\gamma) = V(x), \quad \forall x \in \Gamma$$

  On notera F un domaine fondamental de périodicité de V.

- V est C^∞,
- $\limsup_{|x|\to+\infty} |V(x)| < 1$,
- V admet un seul puits non dégénéré par cellule de périodicité, on supposera quitte à changer d'origine, que Γ est l'ensemble des puits. On suppose aussi qu'on a choisi le domaine F de telle sorte que O soit le centre de F.

Soit Γ^* le réseau dual de Γ et soit $\theta \in I\!R^3/\Gamma^*$. Soit L^2_θ l'ensemble des fonctions de $L^2(F)$ qui se prolongent en une fonction sur $I\!R^3$ vérifiant les conditions de périodicité:

$$u(x+\gamma) = e^{i\theta.\gamma}u(x), \quad \forall \gamma \in \Gamma$$

Alors l'opérateur D_θ défini sur L^2_θ par l'action de $D_V(h)$ admet un spectre discret et le spectre de $D_V(h)$ est la réunion, lorsque θ parcourt $I\!R^3/\Gamma^*$ de ces spectres.

On s'intéresse maintenant à la partie du spectre de $D_V(h)$ proche de $E = 0$. Considérons le problème à un puits D_1 obtenu à partir de D_V en "bouchant" tous les puits de potentiels de V sauf celui situé à l'origine (en pratique, on définit un potentiel $\tilde{V}$ égal à V sauf sur des boules de taille ε centrées sur $\Gamma - \{0\}$ où l'on augmente [respectivement diminue] $\tilde{V}$ si $V(0) = -1$ [respectivement $V(0) = 1$]). Soient u_1 et $u_2 = Ku_1$ une base de fonctions propres de D_1 correspondant à une énergie $E_n(h) \in \pm[0, Ch]$ et soit χ une troncature à support compact dans F et valant 1 dans un voisinage de l'origine. Alors χu_1 et χu_2 forment un couple de quasi-modes indépendants de D_θ de quasi-énergie $E_n(h)$. Ceci montre que le spectre de D_θ ne dépend que de manière exponentiellement faible de θ. Le spectre de D_V au voisinage de $E = 0$ est donc constitué de bandes de largeur exponentiellement petite. Il est alors naturel:

- de déterminer la taille de ces bandes,
- de voir si une valeur propre double de D_1 donne deux valeurs propres distinctes de D_θ.

Pour cela, il suffit d'améliorer nos quasi-modes χu_1 et χu_2 puis de diagonaliser la matrice de $D - E_n(h)$ dans cette base de quasi-modes.

Soit S la distance d'Agmon minimale entre deux points du réseau Γ. On construit une nouvelle fonction de troncature χ telle que:

- $\chi(x) = 1$ si $d(O,x) < S/2 + \varepsilon_0$, où $\varepsilon_0 < S/2$ est fixé,

- $\chi(x) = 0$ si $d(O,x) > S - \varepsilon_0$.

Pour fixer les idées, on peut observer que si les distances d'Agmon latérales, longitudinales et verticales du réseau Γ sont du même ordre de grandeur, $\chi = 1$ sur F , alors que $\chi = 0$ sur $\Gamma - \{0\}$. On ne peut plus prendre χu_1 et χu_2 comme quasi-modes car ils ne sont pas θ-Floquet périodiques (ci-dessus ils l'étaient car ils étaient nuls au bord de F). On les périodise donc en posant pour $j = 1, 2$:

$$\tilde{u}_j(x) = \sum_{\gamma \in \Gamma} e^{i\theta.\gamma}(\chi u_j)(x-\gamma) = \sum_{\gamma} e^{i\theta.\gamma}|\gamma >_j$$

Pour x fixé, la somme sur γ est en fait finie car χ est à support compact. Comme on va le voir, les effets d'interactions sont de l'ordre de $e^{-S/h}$. On va donc adopter la notation $\equiv$ pour dire que:

- deux réels sont égaux à une erreur d'ordre exponentiellement petite devant $e^{-S/h}$:

$$r \equiv r' \quad \text{si} \quad r - r' = O\left(e^{-(S+\varepsilon_0)/h}\right)$$

- deux fonctions sont égales (au sens L^2 ou H^1) à une erreur d'ordre exponentiellement petite devant $e^{-S/2h}$ (le coefficient 2 vient du fait que les réels sont construits en calculant des normes au carré ou des produits scalaires).

Supposons pour fixer les idées que les deux points les plus proches de O pour la distance d'Agmon soient $(-\gamma_1, 0, 0)$ et $(\gamma_1, 0, 0)$: *cf.* figure 1, p. 15. Plus loin, on notera simplement $-\gamma_1$ et γ_1 qui désignera donc selon le contexte un point ou un réel. Alors, sur F, on a:

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_j &= u_j + e^{i\gamma_1\theta_1}|\gamma_1 >_j + e^{-i\gamma_1\theta_1}|-\gamma_1 >_j \\
(\tilde{u}_j|\tilde{u}_k)_{1\le j,k\le 2} &\equiv I_2 \\
(D - E_n(h))\tilde{u}_j &= e^{i\gamma_1\theta_1}(D - E_n)|\gamma_1 >_j + e^{-i\gamma_1\theta_1}(D - E_n)|-\gamma_1 >_j = O\left(e^{-\frac{1}{2h}(S+\varepsilon)}\right)
\end{aligned}$$

Les valeurs propres $\mu^{\pm}$ de la matrice d'interaction $((D - E_n(h))\tilde{u}_j|u_k)_{j,k}$ sont donc équivalentes au sens ci-dessus aux $E_n^{\pm}(\theta) - E_n(h)$. Comme sur F, on a:

$$u_k - \tilde{u}_k = O\left(e^{-\frac{1}{2h}(S+\varepsilon)}\right)$$

on en déduit:

$$((D - E_n(h))\tilde{u}_j|\tilde{u}_k) \equiv e^{-i\gamma_1\theta_1}((D - E_n)|\gamma_1 >_j |u_k(x)) + e^{i\gamma_1\theta_1}((D - E_n)|-\gamma_1 >_j |u_k(x))$$

Supposons qu'il existe une unique géodésique l^+ reliant O à $(\gamma_1, 0, 0)$. Alors la première intégrale est équivalente (au sens ci-dessus) à l'intégrale sur un voisinage Ω^+ de l'intersection de l^+ et du support de $\nabla\chi(x-\gamma_1)$. De même, la deuxième intégrale est équivalente à l'intégrale sur un voisinage Ω^- de l'intersection du translaté l^- par $(-\gamma_1, 0, 0)$ de l^+ et du support de $\nabla\chi(x+\gamma_1)$.

Pour évaluer ces deux intégrales, l'idée est de faire passer $D - E_n(h)$ de l'autre côté, en utilisant le fait que D est formellement autoadjoint. Il ne restera alors que des termes de bord sur $\partial\Omega^+$ et $\partial\Omega^-$ puisque $(D - E_n(h))u_k = 0$. On évalue alors ces termes de bord en remplaçant les fonctions par leurs approximations BKW et en appliquant le théorème de la phase stationnaire, ce qui suppose une hypothèse de non-dégénérescence de la géodésique l^+. Le terme (j,k) de la matrice d'interaction vaut alors d'après le théorème de Stokes:

$$e^{-i\gamma_1\theta_1}\int\int_{\partial\Omega^+}(ihn_\alpha^+\chi u_{j,\gamma_1}^{BKW}(x)|u_{k,O}^{BKW}(x)) + e^{i\gamma_1\theta_1}\int\int_{\partial\Omega^-}(ihn_\alpha^-\chi u_{j,-\gamma_1}^{BKW}(x)|u_{k,O}^{BKW}(x)) + O(h^\infty e^{-S/h})$$

où $n_\alpha^{\pm}$ désigne la normale extérieure à $\partial\Omega^{\pm}$ exprimée dans la base $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$ et $u_{j,P}^{BKW}$ désigne la solution BKW correspondant à u_j issue du point P.

Soit $d^{\pm}(x) = d(O,x) + d(x, \pm\gamma_1)$. Sur la géodésique l^+, on a $d^+(x) = S$ et $\nabla d^+ = 0$. On suppose que l^+ est non dégénérée, c'est-à-dire que la hessienne transversale de d^+ est définie positive le long de l.

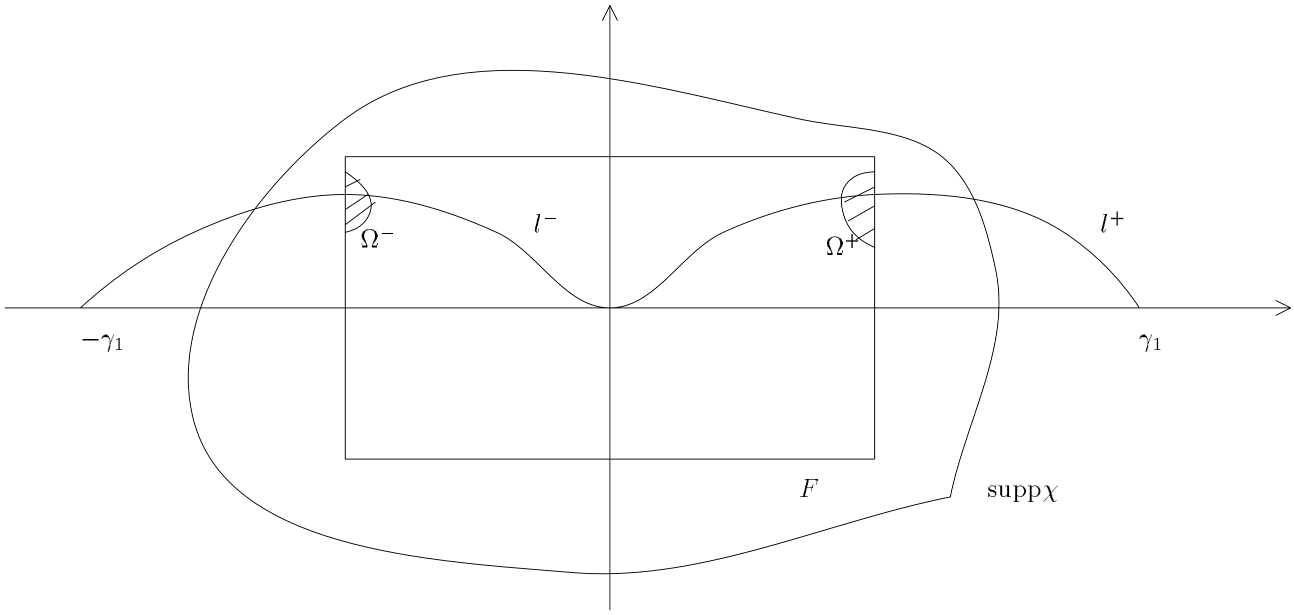

Figure 1: Calcul de la matrice d'interaction.

Comme le terme exponentiel par rapport à h dans l'intégrale sur $\partial\Omega^+$ est justement $e^{-d^+(x)/h}$, le lemme de la phase stationnaire montre que le terme (j,k) de la matrice d'interaction admet un développement semi-classique dont le terme principal est:

$$e^{-i\gamma_1\theta_1}\frac{2\pi h^2}{\sqrt{\det(d^+)''_{|(\partial\Omega^+)^\perp}(x^+)}}(in_\alpha^+ w_{j,\gamma_1}(x^+)|w_{k,O}(x^+))e^{-S/h}$$
$$+\quad e^{i\gamma_1\theta_1}\frac{2\pi h^2}{\sqrt{\det(d^-)''_{|(\partial\Omega^-)^\perp}(x^-)}}(in_\alpha^- w_{j,-\gamma_1}(x^-)|w_{k,O}(x^-))e^{-S/h}$$

où $x^\pm$ désigne le point de $\partial\Omega^\pm\cup l^\pm$ tel que $\chi(x^\pm\pm\gamma_1)=1$ et $w_{j,P}$ désigne le symbole principal de la solution BKW issue de P correspondant à u_j (c'est le terme w_0 dans (4).

Pour utiliser la périodicité, on aimerait que $x^+=x^-+\gamma_1$. On choisit donc Ω^+ et Ω^- de telle sorte que $x_1^+=\gamma_1/2$ et $x_1^-=-\gamma_1/2$ (comme sur la figure). On obtient alors pour le terme (j,k):

$$e^{-S/h}\frac{2\pi h^2}{\sqrt{\det(d^+)''_{|(\partial\Omega^+)^\perp}}}\left[e^{-i\gamma_1\theta_1}(in_\alpha^+ w_{j,\gamma_1}(\frac{\gamma_1}{2})|w_{k,O}(\frac{\gamma_1}{2}))+e^{i\gamma_1\theta_1}(in_\alpha^- w_{j,-\gamma_1}(-\frac{\gamma_1}{2})|w_{k,O}(-\frac{\gamma_1}{2}))\right]$$

Pour faire le lien avec les sections précédentes, il faut exprimer des termes de la forme

$$(n_\alpha^+ w_{j,\gamma_1}|w_{k,0})$$

en fonction du vecteur tangeant t_α à la géodésique. En fait:

$$\frac{1}{\sqrt{\det(d^+)''_{|(n^+)^\perp}(x^+)}}(n_\alpha^+ w_{j,\gamma_1}|w_{k,0})$$

ne dépend pas de la direction de n^+ mais uniquement du sens (sortant ou entrant). En effet, si l'angle entre n^+ et le vecteur tangeant à la géodésique est θ, on a:

$$\det(d^+)''_{|(\partial n^+)^\perp}=\cos^2(\theta)\det(d^+)''_{|(\partial t^\perp}$$

(on le voit facilement en faisant un changment de coordonnées dans le plan engendré par n^+ et t, et en faisant un développement limité à l'ordre 2 de $(d^+)''$ en x^+).

D'autre part, si n est un vecteur orthogonal à la géodésique, alors on applique (31):

$$(n_\alpha a^\rightarrow | b^\leftarrow) = 0$$

donc:

$$(n_\alpha^+ w_{j,\gamma_1} | w_{k,0}) = \cos\theta (t_\alpha w_{j,\gamma_1} | w_{k,0})$$

On peut donc supposer que $n_\alpha^+(x^+)$ est le vecteur tangent à l^+ orienté dans le sens des x_1 décroissants et $n_\alpha^-(x^-)$ le vecteur tangent à l^- orienté dans le sens des x croissants. Par périodicité, on a:

$$(in_\alpha^+ w_{j,\gamma_1}(\frac{\gamma_1}{2})|w_{k,O}(\frac{\gamma_1}{2})) = -(in_\alpha^- w_{j,O}(-\frac{\gamma_1}{2})|w_{k,-\gamma_1}(-\frac{\gamma_1}{2})) = \overline{(in_\alpha^- w_{k,-\gamma_1}(-\frac{\gamma_1}{2})|w_{j,O}(\frac{-\gamma_1}{2}))}$$

En utilisant le fait que $u_2 = Ku_1$ et les propriétés de l'opérateur de Kramers K, on montre que la matrice d'interaction est:

$$M = \frac{4\pi}{\sqrt{d''_{|(l^+)^\perp}(\frac{\gamma_1}{2})}} h^2 e^{-S/h} \begin{pmatrix} \Re(e^{i\gamma_1\theta_1}(in_\alpha^+ w_{1,\gamma_1})|w_{1,O})) & i\sin(\gamma_1\theta_1)(in_\alpha^+ w_{1,\gamma_1})|Kw_{1,O}) \\ -i\sin(\gamma_1\theta_1)\overline{(in_\alpha^+ w_{1,\gamma_1})|Kw_{1,O})} & \Re(e^{i\gamma_1\theta_1}(in_\alpha^+ w_{2,\gamma_1})|w_{2,O})) \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres de M sont les:

$$Ch^2 e^{-S/h}\left[\cos(\gamma_1\theta_1)\Re(in_\alpha^+ w_{1,\gamma_1})|w_{1,O}) \pm i\sin(\gamma_1\theta_1)\sqrt{|\Im(in_\alpha^+ w_{1,\gamma_1})|w_{1,O})|^2 + |(in_\alpha^+ w_{1,\gamma_1})|w_{2,O})|^2}\right]$$

où:

$$C = \frac{4\pi}{\sqrt{d''_{|(l^+)^\perp}(\frac{\gamma_1}{2})}} \tag{34}$$

Finalement les valeurs propres $E_n^\pm(\theta)$ sont:

$$\begin{aligned} E_n^\pm(\theta &= E_n + Ch^2 e^{-S/h}\sqrt{1-V^2}|w_{1,\gamma_1}||w_{1,O}|(\frac{\gamma_1}{2})\left[\cos(\gamma_1\theta_1)\frac{\Re\lambda}{|\lambda|} \pm \sin(\gamma_1\theta_1)\frac{|\Im\lambda|}{|\lambda|}\right] + O(h^\infty)e^{-S/h} \\ &= E_n + Ch^2 e^{-S/h}\sqrt{1-V^2}|w_{1,\gamma_1}||w_{1,O}|(\frac{\gamma_1}{2})\cos(\gamma_1\theta_1 \pm \varphi) + O(h^\infty)e^{-S/h} \end{aligned} \tag{35}$$

La bande de spectre centrée autour de $E_n(h)$ n'est donc pas double génériquement. En fait, chaque valeur propre $E_n^+(\theta)$ ou $E_n^-(\theta)$ parcourt la même bande avec un déphasage par rapport à l'autre valeur propre.

6 Application à l'effet d'Aharonov-Bohm.

Nous améliorons ici le résultat du deuxième auteur (*cf.* [4]) sur le découplage des valeurs propres par un effet de type Aharonov-Bohm, sans faire d'hypothèse de type non relativiste. Il s'agit de l'analogue dans le cas de l'opérateur de Dirac du travail de B.Helffer ([1]) pour l'opérateur de Schrödinger.

Rappelons brièvement le problème considéré: on considère un opérateur de Dirac avec potentiel électrique et champ magnétique ayant les propriétés suivantes:

- le champ électrique possède un puits de potentiel en un point P, on s'intéresse au spectre de l'opérateur de Dirac pour des valeurs de l'énergie correspondant àu puits P,
- le champ magnétique est nul sauf dans un cylindre. On suppose que le cylindre est situé dans unz zone classiquement interdite, à une distance d'Agmon S' de P,
- il existe un unique lacet contenant P et encerclant le cylindre de longueur d'Agmon S minimale parmi les lacets contournant la zone magnétisée,
- $S < 2S'$. C'est-à-dire que si on modifie le potentiel dans le cylindre l'effet sur les valeurs propres est négligeable devant $e^{-S/h}$.

On s'aperçoit alors que l'effet du champ magnétique, bien que confiné dans le cylindre, est de l'ordre de $e^{-S/h}$, plus précisément une valeur propre double $\lambda \sim E_n(h)$ en l'absence de champ magnétique se transforme en deux valeurs propres $\lambda_\pm$ reliées à λ (sous certaines hypothèses de non-dégénérescence du lacet minimal, hypothèses qui sont précisées dans [4]) par:

$$\lambda_\pm = \lambda + \frac{\sqrt{h^{1+|n|}}}{\pi} a(h)(1-\cos(\frac{\Phi}{h})) \pm \frac{\sqrt{h}}{\pi} b(h)\sin(\frac{\Phi}{h}) + O(e^{-(S+\varepsilon_0)/h}),$$

où $a(h)$ et $b(h)$ sont des symboles semi-classiques et Φ est le flux du champ à travers le lacet. On montre que les symboles principaux de $a(h)$ et de $b(h)$ sont proportionnels respectivement à la partie réelle et imaginaires de la valeur propre de l'isomorphisme du lacet contournant la zone magnétisée pris au point situé à mi-distance d'Agmon sur ce lacet. On peut donc les calculer à l'aide du théorème (6) lorsque le lacet minimal reste dans un plan, *et cela sans supposer comme dans [4, Théorème 2] que l'on est en limite non relativiste.* De plus le théorème 7 permet d'affirmer qu'il existe de nombreux exemples de potentiels pour lesquels les valeurs propres $\lambda_\pm$ sont distinctes, puisque leur différence est proportionnelle à $|\Im\lambda|$.

Remerciements.

Le second auteur tient à remercier Luc Rozoy pour les éclaircissements qu'il lui a apporté en géométrie, lui permettant d'aboutir au théorème 7. Ces deux théorèmes suffisent à prouver la non-nullité générique du découplage entre valeurs propres des sections 5 et 6, mais nous n'avons pas su répondre à une question plus ambitieuse:
Existe-t-il des potentiels périodiques dont la géodésique d'Agmon reliant les puits les plus proches soit convexe (i.e. de courbure de signe constant)?

Références

[1] B. Helffer. Effet d'Aharonov-Bohm sur un état borné de l'opérateur de Schrödinger. *Communications in Mathematical Physics*, 119:315–329, 1988.

[2] A. Mohamed, B. Parisse, and Outassourt. Asymptotique de la Largeur de la Première Bande de l'Opérateur de Dirac avec Potentiel Périodique (resp. Erratum). *Helvetica Physica Acta*, 66 (resp. 68):192–215 (resp. 187–188), 1993 (resp. 1995).

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

[4] B. Parisse. Effet d'Aharonov-Bohm sur un état borné de l'opérateur de Dirac. *Asymptotic Analysis*, 10:199–224, 1995.

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