Approximation de Born-Oppenheimer de sections efficaces totales diatomiques.

Th. Jecko [1]
IRMAR, Université de Rennes I,
Campus Beaulieu, F-35042 Rennes cedex.
e-mail : jecko@maths.univ-rennes1.fr

Résumé

Pour des molécules diatomiques dans la limite de Born-Oppenheimer, on construit une approximation adiabatique de plusieurs sections efficaces totales, y compris des sections inélastiques. On montre la prépondérance de la diffusion élastique et l'on en donne des termes dominants. L'un d'eux contient un potentiel effectif, ce qui permet de réduire la diffusion à celle d'un système à deux corps. De plus, l'approximation améliore une borne a priori sur d'autres sections totales.

Abstract

In the Born-Oppenheimer limit, for diatomic molecules, we approximate several total cross-sections, including inelastic ones, by adiabatic equivalents. We show the preponderance of the elastic total cross-section and we give leading terms for it. One of them contains a two-body efficient potential so that the scattering behaviour may be well-approximated by those of some two-body system. Furthermore, the adiabatic approximation improves an a priori bound on some other total cross-sections.

1 Introduction.

La complexité des systèmes quantiques s'accroît fortement lorsque l'on passe de deux corps à trois et plus. L'approximation de Born-Oppenheimer (cf. [BO]), qui profite de la différence de nature des particules, permet de ramener des molécules diatomiques à des problèmes essentiellement à deux corps. En théorie stationnaire de la diffusion, cette approximation a été validée pour certains opérateurs d'onde de canal d'une molécule diatomique (cf. [KMW]). Dans l'esprit de [KMW], on introduit une approximation de Born-Oppenheimer de plusieurs sections efficaces totales, à angle d'incidence fixé, pour une molécule diatomique. Pour approximer des sections efficaces totales inélastiques, l'approximation de [KMW], de la résolvante par une résolvante adiabatique, s'avère insuffisante. On utilise celle de [Jec-2], rappelée dans le Théorème 2.3, car l'opérateur adiabatique P^{AD} prend en compte plusieurs états électroniques. En adaptant les arguments de [I1],

1. previous address : Fachbereich Mathematik MA 7-2, Technische Universität Berlin, Strasse des 17. Juni 136, D-10623 Berlin, Germany,

[I2], [RT], [RW] et [W], certaines sections efficaces totales de la molécule diatomique sont approximées par des sections efficaces totales construites à partir de l'opérateur adiabatique P^{AD}.

Comme dans l'asymptotique des sections efficaces totales relativement à la constante de Planck $\hbar$ (cf. [RW] et [I2]), on montre la prépondérance de la diffusion élastique et on exibe un terme dominant analogue. De plus, on détermine d'autres termes dominants (cf. Théorème 1.2) présentant un intérêt physique et l'approximation précédente permet une estimation a priori sur d'autres sections efficaces totales (cf. corollaire 1.5).

Contrairement à l'habitude, les sections efficaces totales considérées ici ne sont pas construites à partir de l'amplitude de diffusion (cf. [AJS]). Comme dans [RW], on préfère les définir comme des distributions sur l'énergie, selon une idée de Enss-Simon (cf. [ES]). Le lien entre les deux définitions est exposé formellement dans [RW] et justifié dans [Jec-1].

Pour plus de détails sur l'approximation de Born-Oppenheimer, on renvoie le lecteur aux références indiquées dans [KMSW] et [Jec-1]. Au sujet des sections efficaces totales, on peut consulter [I1], [I2], [RT], [RW] et [W]. Signalons que, dans [CT], l'amplitude de diffusion est étudiée pour des potentiels coulombiens. Ici, les potentiels seront réguliers avec une forte décroissance à l'infini (cf. Théorème 1.2). Pour une approche temporelle de la situation présente, on peut consulter [Kar].

Détaillons brièvement le cadre de ce travail (voir aussi [Jec-2]). Considérant une molécule diatomique à N électrons, son opérateur d'énergie, auto-adjoint dans $L^2(I\!R^{n(N+2)})$, est

$$\tilde{H} \;=\; -\frac{1}{2m_1}\Delta_{x_1} - \frac{1}{2m_2}\Delta_{x_2} + \sum_{j=3}^{N+2}(-\frac{1}{2}\Delta_{x_j}) + \sum_{l<j} V_{lj}(x_l - x_j), \tag{1.1}$$

(on a fixé la masse des électrons à 1 ainsi que la constante de Planck et on suppose que les particules se meuvent dans $I\!R^n$, pour $n \geq 2$). Les masses respectives des deux noyaux, m_1 et m_2, sont grandes devant 1 (h donné par (2.5) sera donc petit), les fonctions réelles V_{lj} représentent les interactions bilatérales entre particules et Δ_{x_j} désigne le laplacien en la variable x_j. Soit $a = (A_1, A_2)$ une décomposition de $\{1, \dots, N+2\}$ en deux amas telle que $j \in A_j$, pour $j \in \{1, 2\}$. En effectuant un changement de variables convenable, on est amené, après retrait du mouvement du centre de masse, à étudier l'opérateur

$$P(h) \;=\; -h^2\Delta_x + P^a(h) + I_a(h),$$

agissant dans $L^2(I\!R^{n(N+1)})$ (voir la partie 2 pour les expressions de $P^a(h)$ et $I_a(h)$). L'hamiltonien interne $P^a(h)$ est la somme des opérateurs d'énergie de chaque amas, considérés comme isolés, et le potentiel inter-amas $I_a(h)$ rassemble les interactions entre particules appartenant à deux amas différents. La variable $x \in I\!R^n$ représente la position relative des centres de masse des amas et on note par $y \in I\!R^{nN}$ les autres variables. On considère la famille des hamiltoniens électroniques $P_e(x; h)$, $x \in I\!R^n$, $h \leq h_0$, pour un certain $h_0 > 0$ petit, définis par

$$P_e(x; h) \;=\; P^a(h) + I_a(x; h),\ \forall x \in I\!R^n,\ \forall h \leq h_0.$$

En physique, ce sont précisément ces opérateurs pour $h = 0$ (c'est-à-dire pour une masse nucléaire infinie) qui représentent la molécule dans l'approximation de Born-Oppenheimer.

L'évolution libre de référence sera la restriction à un sous-espace propre de $P^a(h)$ de

$$t \mapsto e^{ih^{-1}tP_a(h)} \quad \text{avec} \quad P_a(h) \;\equiv\; -h^2\Delta_x + P^a(h).$$

En notant $\langle x\rangle = (1+|x|^2)^{1/2}$, les interactions bilatérales apparaissant dans ces opérateurs seront des fonctions $V \in C^\infty(I\!R^n; I\!R)$, vérifiant, pour un certain $\rho > 0$,

$$\forall \alpha \in I\!N^n,\ \exists C_\alpha > 0;\ \forall x \in I\!R^n,\ |\partial_x^\alpha V(x)| \le C_\alpha \langle x\rangle^{-\rho-|\alpha|}. \qquad (D_\rho)$$

Construisons maintenant l'opérateur adiabatique P^{AD}. Soient $E_1 < \ldots < E_r$ les r premières valeurs propres du spectre discret de $P^a(0)$, chaque E_j étant de multiplicité p_j, pour $j \in \{1, \cdots, r\}$. Pour chaque j, on suppose qu'il y a exactement p_j “courbes” $x \mapsto \lambda_{jl}(x;0)$, pour $l \in \{1, \cdots, p_j\}$, de valeurs propres $\lambda_{jl}(x;0)$ de $P_e(x;0)$ (répétées autant que leur multiplicité), qui tendent vers E_j lorsque $|x| \to \infty$. De plus, on suppose que ces applications $x \mapsto \lambda_{jl}(x;0)$, à valeurs dans le spectre $\sigma(P_e(x;0))$ de $P_e(x;0)$, sont globalement définies sur $I\!R^n$. On impose la condition de stabilité suivante.

Définition 1.1 *Pour $\delta > 0$ et pour tout $j \in \{1, \cdots, r\}$, on considère la condition $(H_{j,\delta})$ suivante : il existe des fonctions $e_{j,\pm}$ et $E_{j,\pm}$ et des nombres réels $h_{j,\delta} > 0$ tels que, pour tout $h \le h_{j,\delta}$,*

$$\left\{\begin{array}{ll} & \displaystyle\inf_{x\in I\!R^n}\Big|E_{j,\pm}(x) - e_{j,\pm}(x)\Big| \;\ge\; \delta. \\[2ex] \forall x \in I\!R^n, & e_{j,-}(x) \;<\; E_{j,-}(x) \;<\; e_{j,+}(x) \;<\; E_{j,+}(x), \\[2ex] \forall x \in I\!R^n, & \lambda_{j1}(x;0), \ldots, \lambda_{jp_j}(x;0) \;\in\,]E_{j,-}(x); e_{j,+}(x)[, \\[2ex] \forall x \in I\!R^n, & \sigma\Big(P_e(x;h)\Big) \cap \Big([e_{j,-}(x); E_{j,-}(x)] \cup [e_{j,+}(x); E_{j,+}(x)]\Big) = \emptyset. \end{array}\right\} \qquad (H_{j,\delta})$$

Sous la condition précédente, pour le même δ et pour $h_\delta = \min_{1\le j\le r} h_{j,\delta}$, en notant par $1\!\!\mathrm{I}_{]E_{j,-}(x),e_{j,+}(x)[}$ la fonction caractéristique de l'intervalle $]E_{j,-}(x), e_{j,+}(x)[$, on introduit la condition suivante. Il existe un $R_0 > 0$ tel que, pour tout $|x| \ge R_0$ et tout $h \in [0, h_\delta]$,

$$\dim \mathrm{Im}\Big(1\!\!\mathrm{I}_{]E_{j,-}(x),e_{j,+}(x)[}\Big(P_e(x;h)\Big)\Big) = p_j. \qquad (H_{j,\delta})'$$

Si ces conditions $(H_{j,\delta})$ et $(H_{j,\delta})'$ sont satisfaites, pour un certain $\delta > 0$, on dira que E_j vérifie **l'hypothèse de stabilité semi-classique**.

Pour h assez petit, il existe aussi une valeur propre $\lambda_{jl}(x;h)$ de $P_e(x;h)$ qui tend vers $\lambda_{jl}(x;0)$ lorsque $h \to 0$ (cf. [Jec-2]). De plus, à l'aide d'une formule de Cauchy, on peut exprimer le projecteur spectral $\Pi(x;h)$ de $P_e(x;h)$, associé à toutes les valeurs propres $\lambda_{jl}(x;h)$. Au moyen d'une intégrale directe, on définit

$$\Pi(h) \;\equiv\; \int_{I\!R^n}^{\oplus} \Pi(x;h)\,dx.$$

La partie adiabatique de $P(h)$ est donnée par

$$P^{AD}(h) \;=\; \Pi(h)P(h)\Pi(h).$$

On s'intéresse aux sections efficaces totales issues d'un canal d'entrée

$$\alpha = (a, E_\alpha(h), \phi_\alpha(h)),\ \text{i.e. } P^a(h)\phi_\alpha(h) \;=\; E_\alpha(h)\phi_\alpha(h) \text{ et } \|\phi_\alpha(h)\|_{L^2(\boldsymbol{R}_y^{nN})} \;=\; 1, \quad (1.2)$$

dont l'énergie $E_\alpha(h)$ tend vers E_{j_α} $(1 \leq j_\alpha \leq r)$ quand $h \to 0$. Pour un tel canal d'entrée α et pour des canaux de sortie β, de décomposition a et d'énergie discrète, l'existence des sections efficaces totales, à angle d'incidence fixé ω sur la sphère S^{n-1}, $\sigma_\alpha(\cdot, \omega; h)$ et $\sigma_{\beta\alpha}(\cdot, \omega; h)$ (cf. partie 2) est connue pour $\rho > \frac{n+1}{2}$ (cf. [RW], [W]). De même, on montre l'existence des sections efficaces totales adiabatiques correspondantes, construites à partir de l'opérateur $P^{AD}(h)$. Le résultat principal de ce travail est le suivant.

Théorème 1.2 *On suppose que les potentiels vérifient la condition (D_ρ) pour un certain $\rho > \frac{n+1}{2}$ et que l'hypothèse de stabilité semi-classique (cf. Définition 1.1) et l'hypothèse de "non-croisement" (cf. Définition 2.1) sont remplies pour chaque E_j $(1 \leq j \leq r)$. On suppose aussi que*

$$E_r < E^{AD} \;\equiv\; \inf_{x \in \boldsymbol{R}^n} \inf\Big\{\sigma\Big(P_e(x;0)\Big) \setminus \Big\{\lambda_{jl}(x;0),\, \forall j, l\Big\}\Big\}. \quad (1.3)$$

Soit $J \subset]E_{j_\alpha}; E^{AD}[$ un intervalle compact, de non-capture pour chaque hamiltonien classique $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0)$ (cf. Définition 2.2), et $\gamma = \frac{1}{\rho-1}$.

Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément pour $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$, on ait

$$\begin{aligned}
\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) &= O(h^{\gamma(1-n)}), && (1.4)\\
\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) - \sigma_{\alpha\alpha}(\lambda, \omega; h) &= O(h^{\gamma(1-n)+\epsilon_0}), && (1.5)\\
\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) - \sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega; h) &= O(h^{(\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}), && (1.6)\\
\sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega; h) - \sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda, \omega; h) &= O(h^{\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}), && (1.7)
\end{aligned}$$

où β est un canal de sortie, de décomposition a, dont l'énergie tend vers une certaine E_{j_β} $(1 \leq j_\beta \leq r)$ quand $h \to 0$. En définissant $n_\alpha(\lambda) = (\lambda - E_{j_\alpha})^{1/2}$ et $I_a(x;h)$ par (2.6), en désignant par H_ω l'hyperplan orthogonal à ω, on a, pour

$$I(x) \;=\; I_a^0(x) \;\equiv\; I_a(x;h)|_{y=0} \text{ et } I(x) \;=\; \hat{I}_a(x) \;\equiv\; \langle I_a(x;0)\phi_\alpha(0), \phi_\alpha(0)\rangle_{L^2(\boldsymbol{R}_y^{nN})},$$

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) = 4C_a(h) \int_{H_\omega} \sin^2\Big(\frac{1}{4hn_\alpha(\lambda)} \int_{\boldsymbol{R}} I(u + s\omega)ds\Big) du + O(h^{\gamma(1-n)+\epsilon_0}) \quad (1.8)$$

et, si $E_\alpha(h)$ converge vers E_1, alors (1.8) est aussi valable pour $I(x) = I_{\text{eff}}(x) \equiv \lambda_1(x;0) - E_1$. Ici, la fonction $C_a(h)$ vérifie $C_a(h) + C_a(h)^{-1} = O(1)$, quand $h \to 0$.

Remarque 1.3 *Il est à noter que l'asymptotique de Born-Oppenheimer ci-dessus présente des similitudes avec l'asymptotique relative à la constante de Planck $\hbar$. Les formules*

(1.4) et (1.8) pour $I = I_a^0$ sont celles obtenues dans [RW] pour les estimations en $\hbar$. La diffusion élastique est prépondérante, d'après (1.5), comme cela était le cas dans [I2] pour l'asymptotique en $\hbar$. Le fait nouveau réside dans le fait que l'on dispose d'une approximation adiabatique des sections efficaces totales issues du canal α et de même décomposition de sortie, dont une conséquence est une estimation a priori, donnée dans le Corollaire 1.5, sur les sections efficaces totales issues de α mais de décomposition de sortie différente (voir aussi la Remarque 2.7). Malheureusement, nous ne disposons pas d'estimation précise des $\sigma_{\beta\alpha}$ pour $\beta \neq \alpha$, mais de même décomposition.

Remarque 1.4 *Par terme dominant, on entend ici un terme* **contenant** *la contribution principale de l'asymptotique. Physiquement, il est naturel d'avoir un terme dominant dépendant des intégrales de recouvrement $\hat{I}_a(x)$, comparable à celui obtenu dans [W] pour les hautes énergies. Le terme dominant contenant I_{eff}, spécifique à la situation présente, est d'une grande importance physique puisqu'il signifie que la diffusion issue du canal α peut être réduite à celle d'un système à deux corps, muni de ce potentiel.*

Considérons un canal δ, associé à une décomposition différente de a, et supposons que la section efficace totale $\sigma_{\delta\alpha}(\cdot, \omega_0; h)$ existe (cf. (2.1)) sur un voisinage ouvert $\tilde{J}$ de J, pour un certain $\omega_0 \in S^{n-1}$. C'est en fait un opérateur auto-adjoint, positif et borné sur $L^2(\tilde{J})$ (cf. Proposition 2.6). On note par $\| \cdot \|$ la norme d'opérateur sur $L^2(J)$. Alors que les estimations (1.4) et (1.5) fournissent seulement

$$\|\sigma_{\delta\alpha}(\cdot, \omega_0; h)\| \; = \; O(h^{\gamma(1-n)+\epsilon_0}), \tag{1.9}$$

les approximations (1.6) et (1.7) permettent d'obtenir le

Corollaire 1.5 *Sous les hypothèses du Théorème 1.2 et les conditions précédentes, la section efficace totale $\sigma_{\delta\alpha}(\cdot, \omega_0; h)$ se prolonge en un opérateur auto-adjoint, positif et borné sur $L^2(\tilde{J})$, dont la norme d'opérateur sur $L^2(J)$ vérifie*

$$\|\sigma_{\delta\alpha}(\cdot, \omega_0; h)\| \; = \; O(h^{\gamma(1-n)+1+\epsilon_0})\,. \tag{1.10}$$

Enfin, on peut se demander si les résultats précédents sont optimaux. La présence du ϵ_0 dans (1.6) et (1.7) suggère que l'approximation adiabatique est en fait meilleure. Quant à (1.4), on démontre, pour un choix particulier d'interactions modélisant grossièrement le cas physique de la diffusion ion-ion, que le terme dominant (1.8) pour I_a^0 est non nul (cf. partie 5). On utilise pour cela un argument de [Y].

Ce travail est organisé de la façon suivante. Les sections efficaces totales sont définies et exprimées dans la partie 2. Admettant (1.4), (1.6) et (1.7), on y montre le Corollaire 1.5. Dans les parties 3 et 4, on établit (1.4), (1.6) et (1.7). Enfin, la partie 5 est consacrée à la prépondérance de la diffusion élastique (1.5) et aux termes dominants (1.8).

Table des matières

1 Introduction. **1**

2 Sections efficaces totales. **6**

3 Preuve du Théorème 2.4 **13**

4 Preuve du Théorème 2.5 **26**

5 Termes dominants de σ_α, prépondérance de la diffusion élastique. **33**

Références. **35**

REMERCIEMENTS.

L'auteur est très reconnaissant envers X.P. Wang pour son soutien constant et ses nombreuses suggestions, J.M. Combes et A. Martinez pour leurs remarques et leur intérêt pour ce travail. L'auteur tient aussi à remercier les membres du département de mathématiques de la TU Berlin pour leur hospitalité et en particulier V. Bach.

L'auteur est soutenu financièrement par le programme européen TMR de la Commission Européenne, intitulé :“ Network Postdoctoral training programme in partial differential equations and application in quantum mechanics”.

2 Sections efficaces totales.

Dans cette partie, on rappelle brièvement la définition, inspirée de Enss-Simon (cf. [ES]), des sections efficaces totales à angle d'incidence fixé. On s'intéresse à certaines sections efficaces totales issues d'un canal à α deux amas, dont l'existence et l'expression en terme de valeur au bord de la résolvante de $P(h)$ sont connues (cf. [RW], [I2]). De la même façon, on définit des sections efficaces totales adiabatiques, dont on montre l'existence et dont on donne une expression en fonction de la résolvante adiabatique $R^{AD}(h)$. Après avoir rappelé des estimations semiclassiques de résolvantes de [Jec-2] (cf. Théorème 2.3), on énonce ensuite les résultats d'approximation (cf. Théorèmes 2.4 et 2.5) qui seront démontrés dans les parties 3 et 4. En admettant ces résultats, on prouve ensuite le Corollaire 1.5, concernant les autres sections efficaces totales issues du canal α.

Pour définir les sections efficaces totales, on utilise le formalisme d'Agmon (cf. [A]) pour les opérateurs de Schrödinger à plusieurs corps (voir aussi [W] ou [Jec-1]). Rappelons que l'on considère $N+2$ particules, dont N électrons. Dans $I\!R^{n(N+2)}$ et son dual, on note par $(\cdot,\cdot)$ et par $|\cdot|$ le produit scalaire et la norme usuels, tandis que la dualité est notée par $\omega\cdot r$, pour $\omega\in(I\!R^{n(N+2)})^*$ et $r\in I\!R^{n(N+2)}$. Avec les notations de l'introduction, on note par q la restriction de la forme quadratique

$$\tilde{q}(r) \;=\; 2m_1|x_1|^2 + 2m_2|x_2|^2 + \sum_{j=3}^{N+2} 2|x_j|^2$$

$$\text{à } X \;=\; \Big\{ r = (x_1, \cdots, x_{N+2}) \in I\!R^{n(N+2)};\; m_1x_1 + m_2x_2 + \sum_{j=3}^{N+2} x_j \;=\; 0 \Big\}.$$

La géométrie de l'espace X dépend donc du paramètre h (cf. (2.5)). Soit $\mathcal{A}$ l'ensemble des décompositions en amas de $\{1, \cdots, N+2\}$. Pour chaque décomposition $d \in \mathcal{A}$, on définit des espaces X^d et X_d, supplémentaires orthogonaux dans X par rapport à q. On note par $\pi^d r$ (respectivement $\pi_d r$) la projection orthogonale du vecteur $r \in X$ sur X^d (respectivement X_d). Au moyen de ces espaces, on munit $\mathcal{A}$ de l'ordre partiel $c \subset d \iff X^c \subset X^d$ (cf. [Jec-1]). Après retrait du centre de masse, on peut écrire l'opérateur $\tilde{H}$ donné par (1.1) sous la forme

$$H \;=\; -\Delta_X + \sum_{c \in \mathcal{A}} V_c(x^c)$$

où $-\Delta_X$ est l'opérateur de Laplace-Beltrami sur X et les fonctions V_c vérifient la condition (D_ρ). Cet opérateur H est considéré comme opérateur auto-adjoint non borné dans l'espace L^2 sur X, muni de la mesure de Lebesgue. En notant par $-\Delta^d$ (respectivement $-\Delta_d$) le laplacien en la variable $\pi^d r$ (respectivement $\pi_d r$), on pose

$$H^d \;=\; -\Delta^d + \sum_{c \subset d} V_c(x^c),\;\; H_d \;=\; -\Delta_d + H^d,\;\; I_d(r) \;=\; \sum_{c \not\subset d} V_c(x^c)$$

si bien que $H = H_d + I_d(r)$. Soit $\delta = (d, E_\delta, \psi_\delta)$ un canal de décomposition d i.e.

$$H^d\psi_\delta \;=\; E_\delta\psi_\delta,\;\; \|\psi_\delta\|_{L^2(X^d)} \;=\; 1.$$

On pose $N_\delta(\lambda) = (\lambda - E_\delta)^{1/2}$. On note par X_d^* le dual de X_d, que l'on munit de la forme quadratique q_d^*, restriction à X_d^* de

$$q^*(\xi_1, \cdots, \xi_{N+2}) \;=\; \frac{1}{2m_1}|\xi_1|^2 + \frac{1}{2m_2}|\xi_2|^2 + \sum_{j=3}^{N+2} \frac{1}{2}|\xi_j|^2.$$

Pour $\omega_d \in X_d^*$, de norme q_d^* égale à 1, les fonctions $r_d \mapsto \exp(iN_\delta(\lambda)\omega_d \cdot r_d)$ sont des fonctions propres généralisées de $-\Delta_d$ de valeurs propres $N_\delta(\lambda)^2 = \lambda - E_\delta$. Pour $g \in C_0^\infty(]E_\delta; +\infty[)$ et $r_d \in X_d$, on considère le paquet d'onde

$$G_{\omega_d}(r_d) \;=\; \frac{|\omega_d|^{1/2}}{2\sqrt{\pi}} \int_{I\!R} e^{iN_\delta(\lambda)\omega_d \cdot r_d} \frac{g(\lambda)}{N_\delta(\lambda)^{1/2}} d\lambda.$$

Notons qu'il existe $\omega_d^\sharp \in X_d$ tel que, pour tout $r_d \in X_d$, $\omega_d \cdot r_d = (\omega_d^\sharp, r_d)$. On pose $\omega = \omega_d^\sharp / |\omega_d^\sharp|$. Comme la fonction G_{ω_d} ne dépend que de la projection orthogonale sur ω de

r_d (pour le produit scalaire usuel de $I\!R^{n(N+2)}$), on a choisi la constante de normalisation de G_{ω_d} de sorte que

$$\|G_{\omega_d}\|_{L^2(I\!R\omega)} \;=\; \|g\|_{L^2(I\!R)}$$

Soit $\mathcal{C}$ l'ensemble des canaux. Pour tout canal de sortie $\tau \in \mathcal{C}$, on voudrait appliquer l'opérateur $T_{\tau\delta}$, de transition de τ à δ (bien défini cf. [SS]), à $G_{\omega_d}(\pi_d r)\psi_\delta(\pi^d r)$. Malheureusement, cette dernière n'appartient pas à $L^2(X)$. Elle ne décroit pas les directions orthogonales à ω, c'est pourquoi l'on introduit une régularisation $(H_{R,\omega_d})_{R>0}$ formée de fonctions de la variable $\pi_d r - (\omega, \pi_d r)\omega$, qui appartiennent à l'espace de Schwartz et qui tendent ponctuellement vers 1 lorsque $R \to \infty$. Si, pour toute fonction $g \in C_0^\infty(]E_\delta; +\infty[)$, la limite

$$\lim_{R\to\infty} \|T_{\tau\delta} H_{R,\omega_d} G_{\omega_d} \psi_\delta\|^2$$

existe, ne dépend pas du choix de la régularisation et si ces limites définissent une forme quadratique $q_{\tau\delta}$, continue sur $C_0^\infty(]E_\delta; +\infty[)$, alors, en notant par $B_{\tau\delta}$ la forme sesquilinéaire associée à $q_{\tau\delta}$, la section efficace totale $\sigma_{\tau\delta}(\cdot, \omega_d)$ existe et est l'application antilinéaire continue

$$\begin{array}{rcl} C_0^\infty(]E_\delta; +\infty[) & \longrightarrow & \mathcal{D}'(]E_\delta; +\infty[) \\ g & \mapsto & B_{\tau\delta}(g, \cdot)\,. \end{array} \tag{2.1}$$

En notant par $\langle \cdot, \cdot \rangle'$ la dualité entre $\mathcal{D}'$ et C_0^∞, on a, pour $g \in C_0^\infty(]E_\delta; +\infty[)$,

$$\langle \sigma_{\tau\delta}(\cdot, \omega_d)(g), g \rangle' \;=\; q_{\tau\delta}(g) \;=\; \lim_{R\to\infty} \|T_{\tau\delta} H_{R,\omega_d} G_{\omega_d} \psi_\delta\|^2. \tag{2.2}$$

De même, on définit la distribution $\sigma_\delta(\cdot, \omega_d)$ en remplaçant la limite précédente par

$$\lim_{R\to\infty} \sum_{\tau\in\mathcal{C}} \|T_{\tau\delta} H_{R,\omega_d} G_{\omega_d} \psi_\delta\|^2. \tag{2.3}$$

De telles distributions n'existent pas forcément pour tout angle d'incidence ou n'existent a priori que sur un ouvert strictement inclu dans $]E_\delta; +\infty[$ (cf. [W]). On s'intéresse tout particulièrement aux sections efficaces issues du canal $\alpha = (a, E_\alpha, \psi_\alpha)$ (cf. (1.2)). Soient

$$\beta = (a, E_\beta, \psi_\beta), \text{ avec } E_\beta \to E_{j_\beta}, \text{ quand } h \to 0, \tag{2.4}$$

pour un $1 \leq j_\beta \leq r$ ($E_{j_\alpha} \neq E_{j_\beta}$ est possible si $r > 1$) un canal "adiabatique" et $\mathcal{C}^{AD}$ l'ensemble de tels canaux. D'après [RW] et [W], sous la condition (D_ρ) avec $\rho > \frac{n+1}{2}$, les sections efficaces totales σ_α et $\sigma_{\beta\alpha}$ existent en dehors des seuils de H, pour tout angle d'incidence, elles s'identifient à la multiplication par des fonctions continues de l'énergie λ, encore notée σ_α et $\sigma_{\beta\alpha}$, et ces fonctions s'expriment en fonction de la valeur au bord de la résolvante de H.

Afin de procéder aux estimations semi-classiques, on introduit les variables (x, y) et on exprime tous les objets en fonction de ces variables (voir [Jec-1] pour plus de détails). Tandis que la variable $x \in I\!R^n$ repère la position relative des centres de masse des amas, on prend des coordonnées atomiques dans chaque amas. On obtient ainsi N variables internes que l'on désigne par $y \in I\!R^{nN}$. Pour $k \in \{1, 2\}$, notons par A'_k l'ensemble des électrons de l'amas A_k, par $|A'_k|$ le cardinal de cet ensemble et par $M_k = m_k + |A'_k|$ la masse totale de l'amas A_k. Le petit paramètre h et les opérateurs $P^a(h)$ et $I_a(x;h)$ sont alors donnés par

$$h \;=\; \left(\frac{1}{2M_1} + \frac{1}{2M_2}\right)^{1/2}, \tag{2.5}$$

$$P^a(h) \;=\; \sum_{k=1}^{2}\left[\sum_{j\in A'_k}\Big(-\frac{1}{2}\Delta_{y_j} + V_{kj}(y_j)\Big) - \frac{1}{2m_k}\sum_{l,j\in A'_k}\nabla_{y_l}\cdot\nabla_{y_j} + \frac{1}{2}\sum_{l,j\in A'_k} V_{lj}(y_l - y_j)\right],$$

$$\begin{aligned} I_a(x;h) \;&=\; \sum_{l\in A'_1,\, j\in A'_2} V_{lj}(y_l - y_j + x + f_2 - f_1) + \sum_{l\in A'_1} V_{l2}(x - f_1 + f_2 + y_l) \\ &\quad + \sum_{j\in A'_2} V_{1j}(x - f_1 + f_2 - y_j) + V_{12}(x - f_1 + f_2), \end{aligned} \tag{2.6}$$

où les quantités $f_k = \frac{1}{M_k}\sum_{j\in A'_k} y_j$, pour $k \in \{1,2\}$, dépendent de h (le " $\cdot$ " désigne le produit scalaire des gradients). Pour $l < j$, on a posé $V_{jl}(z) = V_{lj}(-z)$.

Les sections efficaces totales s'exprimant en fonction de résolvantes, on a besoin de contrôler semiclassiquement ces dernières. Le Théorème 2.3 suivant s'en charge. Préalablement, introduisons deux notions requises dans ce théorème.

Définition 2.1 *Pour $j \in \{1,\cdots,r\}$, on dit que E_j vérifie la* **condition de "non-croisement"** *si les valeurs propres de $P_e(x;0)$, qui tendent vers E_j lorsque $|x| \to \infty$, vérifient, pour un certain $l(j) \in \{1,\cdots,p_j\}$,*

$$\forall x \in I\!R^n,\ \lambda_{j1}(x;0) < \ldots < \lambda_{jl(j)}(x;0).$$

Définition 2.2 *Étant donnés un hamiltonien classique $p : I\!R^{2n} \longrightarrow I\!R$ et une énergie $E \in I\!R$, on note par $p^{-1}(E)$ la surface d'énergie E*

$$p^{-1}(E) \;\equiv\; \Big\{(x,\xi) \in I\!R^{2n};\ p(x,\xi) = E\Big\}.$$

On dit que l'énergie E est **non-captive** *pour l'hamiltonien classique p si l'on a*

$$\forall (x,\xi) \in p^{-1}(E), \quad \lim_{t\to+\infty} \|\Phi^t(x,\xi)\| = \infty \quad \text{et} \quad \lim_{t\to-\infty} \|\Phi^t(x,\xi)\| = \infty,$$

Φ^t désignant le flot hamiltonien associé à p et $\|\cdot\|$ la norme euclidienne sur $I\!R^{2n}$. Un intervalle J est dit **non-captif** *pour l'hamiltonien classique p si toute énergie $E \in J$ l'est.*

Considérons, sous l'hypothèse (1.3), un intervalle compact J, non-captif pour les hamiltoniens classiques $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0)$ de sorte que

$$\sup J < E^{AD}. \tag{2.7}$$

Théorème 2.3 *([Jec-2]) On suppose que les potentiels vérifient (D_ρ) pour un réel $\rho > 0$. Soit $E_1 < \ldots < E_r \in \sigma_{disc}(P^a(0))$ vérifiant chacune l'hypothèse de stabilité semi-classique (cf. Définition 1.1) et l'hypothèse de "non-croisement" (cf. Définition 2.1). On note*

$$\forall z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R},\ R(z;h) \equiv (P(h) - z)^{-1},\ R^{AD}(z;h) \equiv (P^{AD}(h) - z)^{-1}.$$

Pour toute énergie $E \notin \{0\} \cup \{E_j, 1 \leq j \leq r\}$, non-captive pour chaque hamiltonien classique $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0)$ (cf. Définition 2.2), $1 \leq j \leq r$ et $1 \leq l \leq l(j)$, pour tout $s > 1/2$, uniformément pour λ assez proche de E,

$$\|\langle x\rangle^{-s} R^{AD}(\lambda \pm i0;h)\Pi\langle x\rangle^{-s}\| \ = \ O(h^{-1}). \tag{2.8}$$

Si, de plus, les potentiels sont à courte portée ($\rho > 1$) et si $E < E^{AD}$, alors, pour $s > 1/2$, uniformément pour λ assez proche de E,

$$\|\langle x\rangle^{-s} R(\lambda \pm i0;h)\langle x\rangle^{-s}\| \ = \ O(h^{-1}), \tag{2.9}$$

$$\Big\|\langle x\rangle^{-s}\Big\{R(\lambda \pm i0;h) - R^{AD}(\lambda \pm i0;h)\Pi\Big\}\langle x\rangle^{-s}\Big\| \ = \ O(1). \tag{2.10}$$

Soit $\tilde{J}$ un intervalle ouvert relativement compact, contenant J, non-captif pour les hamiltoniens classiques $|\xi|^2 + \lambda_{jl}(x;0)$ et vérifiant (2.7). Les canaux de décomposition a, dont l'énergie ne tend vers aucune des E_j, sont "fermés" sur $\tilde{J}$ puisqu'elle est supérieure à E^{AD}, pour h petit. Sur cette bande d'énergie, on va étudier semi-classiquement les autres sections efficaces totales, que l'on exprime d'abord en fonction des variables (x, y).

L'angle d'incidence ω_a est associé à un angle $\omega \in S^{n-1}$ et $N_\alpha(\lambda)$ s'écrit $n_\alpha(\lambda;h) = (\lambda - E_\alpha(h))^{1/2}$. Pour toute fonction $g \in C_0^\infty(\tilde{J})$, le paquet d'onde G_{ω_a} devient

$$g_\omega(x) = \frac{h^{-1/2}}{2\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ih^{-1}n_\alpha(\lambda;h)x\cdot\omega} \frac{g(\lambda)}{n_\alpha(\lambda;h)^{1/2}} d\lambda.$$

A la place de la régularisation $(H_{R,\omega_a})_{R>0}$, on prend une famille $(h_{R,\omega})_{R>0}$ de fonctions de x. Les fonctions propres ψ_α et ψ_β de H^a sont remplacées par $\phi_\alpha(h)$ et $\phi_\beta(h)$, des fonctions propres de $P^a(h)$ (avec les mêmes valeurs propres). On note par $\Pi_\beta(h)$ la projection orthogonale $|\phi_\beta(h)\rangle\langle\phi_\beta(h)|$. Soit χ une fonction nulle près de 0, telle que $1 - \chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n;\mathbb{R})$. On pose

$$L_a(h) \ = \ P(h)\chi - \chi P_a(h). \tag{2.11}$$

Pour tout $\omega \in S^{n-1}$, on note par e_α l'onde plane

$$e_\alpha \ \equiv \ e^{ih^{-1}n_\alpha(\lambda;h)x\cdot\omega}\phi_\alpha(y;h). \tag{2.12}$$

En notant $\Im$ la partie imaginaire, pour une certaine fonction $C_a(h)$ dépendante du choix des variables (x, y) et vérifiant $C_a(h) + C_a(h)^{-1} = O(1)$ quand $h \to 0$, on a, sur $\tilde{J}$, d'après [RW] et [W],

$$\sigma_\alpha(\lambda, \omega; h) \ = \ \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)} \Im\Big\langle R(\lambda + i0;h)I_a e_\alpha\ ,\ I_a e_\alpha\Big\rangle, \tag{2.13}$$

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega;h) = \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)} \Big(\Im\Big\langle R(\lambda+i0)L_a e_\alpha \ , \ \chi^2\Pi_\beta L_a e_\alpha \Big\rangle - \Im\Big\langle L_a\Pi_\beta\chi R(\lambda+i0)L_a e_\alpha \ , \ R(\lambda+i0)L_a e_\alpha \Big\rangle \Big). \tag{2.14}$$

On construit maintenant des sections efficaces totales adiabatiques associées à l'opérateur $P^{AD}(h)$. Comme $P^a(h) \to P^a(0)$ en norme des résolvantes, lorsque $h \to 0$, chaque E_j est limite de p_j valeurs propres de $P^a(h)$. Notons par $\Pi_0(h)$ le projecteur spectral de $P^a(h)$, associé à toutes ces valeurs propres. On introduit les opérateurs d'onde adiabatiques

$$\Omega_\pm^{AD}(h) = s - \lim_{t\to\pm\infty} e^{ih^{-1}tP^{AD}(h)}e^{-ih^{-1}tP_a(h)}\Pi_0(h).$$

Dans [Jec-2], l'existence et la complétude de ces opérateurs d'onde sont démontrées. On peut donc définir un opérateur de diffusion adiabatique $S^{AD}(h)$ par

$$S^{AD}(h) = \Big(\Omega_+^{AD}(h)\Big)^*\Omega_-^{AD}(h).$$

Pour $\beta \in \mathcal{C}^{AD}$ (cf. (2.4)), on procède comme précédement avec les différences suivantes. Le rôle d'opérateur de transition de α à β est joué par

$$\Pi_\beta\Big(S^{AD} - \delta_{\beta\alpha}\Big)\Pi_\alpha.$$

La somme intervenant dans la définition de σ_α^{AD} porte sur $\mathcal{C}^{AD}$ et est multipliée par $C_a(h)$. On pose

$$V^{AD}(h) \ = \ P^{AD}(h) - P_a(h) \quad \text{et} \quad L^{AD}(h) \ = \ P^{AD}(h)\chi - \chi P_a(h). \tag{2.15}$$

Dans [Jec-1], on montre, en adaptant les arguments de [RW] et [W], que les sections efficaces totales σ_α^{AD} et $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}$ existent sur $\tilde{J}$, pour tout angle d'incidence $\omega \in S^{n-1}$, comme multiplication par des fonctions continues de l'énergie λ, que l'on note encore par σ_α^{AD} et $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}$, données par

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h) \ = \ \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)} \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)V^{AD}e_\alpha \ , \ V^{AD}e_\alpha\Big\rangle, \tag{2.16}$$

$$\sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda,\omega) \ = \ \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)} \Big(\Im\Big\langle \Pi R^{AD}(\lambda+i0)L^{AD}e_\alpha \ , \ \chi^2\Pi_\beta\Pi L^{AD}e_\alpha\Big\rangle - \Im\Big\langle L^{AD}\Pi_\beta\chi R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD}e_\alpha \ , \ R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD}e_\alpha\Big\rangle\Big). \tag{2.17}$$

En reprenant les techniques développées dans [RW], on approxime, pour α donné par (1.2), la section efficace totale σ_α par la section adiabatique σ_α^{AD} et on détermine une majoration de ces deux sections. En utilisant des techniques analogues à celles de [I2], on approxime aussi les sections $\sigma_{\beta\alpha}$, avec β donné par (2.4), par leur équivalent adiabatique. C'est l'objet des Théorèmes 2.4 et 2.5 suivants. Les preuves de ces théorèmes sont renvoyées aux parties 3 et 4.

Théorème 2.4 *On se place sous les hypothèses du Théorème 1.2. Uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$, on a (1.4) et il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que l'on ait (1.6).*

Théorème 2.5 *Sous les hypothèses du Théorème 1.2, il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$, on ait (1.7).*

A partir de ces deux théorèmes, on peut donner une estimation des autres sections efficaces totales issues du canal α, du moins de celles qui existent, et établir ainsi le Corollaire 1.5. On s'intéresse donc aux sections $\sigma_{\delta\alpha}$, pour un canal δ associé à une décomposition $d \neq a$. Si une telle section existe sur $\tilde{J}$, comme application antilinéaire continue de $C_0^\infty(\tilde{J})$ dans $\mathcal{D}'(\tilde{J})$, alors les propriétés de σ_α lui impose d'être un opérateur borné sur $L^2(\tilde{J})$! D'après [RT], la section efficace totale σ_α est la multiplication par une fonction continue, encore notée σ_α.

Proposition 2.6 *Dans les conditions du Théorème 2.4, soient $\tau \in \mathcal{C}$ et $\omega_0 \in S^{n-1}$ tels que la section efficace totale $\sigma_{\tau\alpha}(\cdot, \omega_0; h)$ soit définie sur $\tilde{J}$. Alors, elle se prolonge en un opérateur auto-adjoint, positif et borné sur $L^2(\tilde{J})$. De plus, sa norme d'opérateur vérifie*

$$\|\sigma_{\tau\alpha}(\cdot, \omega_0; h)\| \;\leq\; \|\sigma_\alpha(\cdot, \omega_0; h)\|_{L^\infty(\tilde{J})}.$$

Démonstration : Pour toute fonction $g \in C_0^\infty(\tilde{J})$ et tout $R > 0$,

$$\left\| T_{\tau\alpha} h_{R,\omega_0} g_{\omega_0} \phi_\alpha \right\|^2 \;\leq\; \sum_{\tau' \in \mathcal{C}} \left\| T_{\tau'\alpha} h_{R,\omega_0} g_{\omega_0} \phi_\alpha \right\|^2.$$

En laissant tendre R vers l'infini, on obtient, d'après (2.2),

$$0 \;\leq\; q_{\tau\alpha}(g) \;\leq\; \int_{\mathbb{R}} \sigma_\alpha(\lambda, \omega_0; h) |g(\lambda)|^2 d\lambda \;\leq\; \left(\sup_{\tilde{J}} \sigma_\alpha(\cdot, \omega_0; h) \right) \|g\|^2_{L^2(\tilde{J})}.$$

Puisque $C_0^\infty(\tilde{J})$ est dense dans $L^2(\tilde{J})$, on en déduit, d'après [K], que la forme quadratique $q_{\tau\alpha}$ s'étend en une forme quadratique positive et bornée sur $L^2(\tilde{J})$. L'opérateur auto-adjoint positif borné associé n'est autre que le prolongement de la section efficace totale $\sigma_{\tau\alpha}$ et vérifie

$$\|\sigma_{\tau\alpha}(\cdot, \omega_0; h)\| \;\leq\; \sup_{\tilde{J}} \sigma_\alpha(\cdot, \omega_0; h)\,. \;\square$$

En admettant les Théorèmes 2.4 et 2.5, on montre maintenant le Corollaire 1.5. Les arguments qui suivent, permettent aussi d'obtenir, à l'aide de (1.5), l'estimation (1.9). Pour l'asymptotique relative à la constante de Planck, on obtient de même (1.9) à partir de [RW] et [I2] ($\hbar$ remplaçant h).

Démonstration (du Corollaire 1.5) : Par définition de $\sigma_\alpha^{AD}(\cdot, \omega_0; h)$ et des $\sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\cdot, \omega_0; h)$ et compte tenu du fait que ce sont des fonctions continues sur $\tilde{J}$,

$$\forall \lambda \in \tilde{J},\; \sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega_0; h) \;=\; \sum_{\beta \in \mathcal{C}^{AD}} \sigma_{\beta\alpha}^{AD}(\lambda, \omega_0; h) \tag{2.18}$$

Pour toute fonction $g \in C_0^\infty(\tilde{J})$ et tout $R > 0$,

$$\left\| T_{\delta\alpha} h_{R,\omega_0} g_{\omega_0} \phi_\alpha \right\|^2 + \sum_{\beta \in \mathcal{C}^{AD}} \left\| T_{\beta\alpha} h_{R,\omega_0} g_{\omega_0} \phi_\alpha \right\|^2 \;\leq\; \sum_{\tau \in \mathcal{C}} \left\| T_{\tau\alpha} h_{R,\omega_0} g_{\omega_0} \phi_\alpha \right\|^2.$$

En prenant la limite lorsque $R \to \infty$, on obtient,

$$q_{\delta\alpha}(g) + \sum_{\beta \in \mathcal{C}^{AD}} \int_{\mathbb{R}} \sigma_{\beta\alpha}(\lambda, \omega_0; h)|g(\lambda)|^2 d\lambda \ \leq \ \int_{\mathbb{R}} \sigma_\alpha(\lambda, \omega_0; h)|g(\lambda)|^2 d\lambda.$$

D'après la proposition 2.6 et en utilisant sur J les approximations (1.6) et (1.7), la relation (2.18), on obtient (1.10).□

Remarque 2.7 *Pour un intervalle ouvert $\hat{J} \subset J$ et $g \in C_0^\infty(\hat{J})$, soit $\tilde{q}_{\delta\alpha}(g)$ donné par (2.2) en remplaçant la limite par une limite supérieure. La preuve précédente montre qu'il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que*

$$\sup\Big\{ \tilde{q}_{\delta\alpha}(g)\,;\, g \in C_0^\infty(\hat{J}),\, \|g\|^2_{L^2(\hat{J})} = 1 \Big\} \ = \ O(h^{\gamma(1-n)+1+\epsilon_0})\,.$$

3 Preuve du Théorème 2.4

L'objet de ce paragraphe est de prouver le Théorème 2.4. On reprend la démarche suivie dans [RW] et [RT]. Le point nouveau réside dans la présence du projecteur $\Pi(x)$, que l'on contrôle grâce à la Proposition 3.1 ci-dessous. Par souci de complétude, on détaille les arguments, redémontrant ainsi certains résultats de ces références. La preuve se décompose en plusieurs étapes.

A partir des expressions (2.13) et (2.16), à l'aide de la Proposition 3.1 et de la Remarque 3.2 suivantes, on va en fait prouver, en parallèle, (1.6) et

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda, \omega; h) \ = \ O(h^{\gamma(1-n)}). \tag{3.1}$$

Proposition 3.1 *([Jec-2]) Sous la condition (D_ρ) $(\rho > 0)$ et sous l'hypothèse de stabilité semi-classique (cf. Définition 1.1), pour tout $1 \leq j \leq r$,*

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\, \exists D_\alpha > 0;\, \forall x \in \mathbb{R}^n,\, \Big\| \partial_x^\alpha \Big(\Pi(x;h) - \Pi_0(h) \Big) \Big\|_y \leq D_\alpha \langle x \rangle^{-\rho-|\alpha|},$$

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\, \exists D_\alpha > 0;\, \forall x \in \mathbb{R}^n,\, \Big\| (\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi_0(h) \Big\|_y + \Big\| (\partial_x^\alpha I_a)(x;h)\Pi(x;h) \Big\|_y \leq D_\alpha \langle x \rangle^{-\rho-|\alpha|},$$

uniformément pour $h \in [0, h_\delta]$, h_δ assez petit. On a noté par $\|\cdot\|_y$ la norme de $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}_y^{nN}))$. Comme $\Pi(x;h)$ est un projecteur, pour tout $(x;h)$,

$$\Pi(x;h)(\nabla_x \Pi)(x;h)\Pi(x;h) \ = \ 0.$$

Notons de plus que les estimations ci-dessus sont basées sur la décroissance exponentielle, uniforme en h, des fonctions propres de $P^a(h)$ associées aux valeurs propres qui tendent vers les E_j, $1 \leq j \leq r$, lorsque h tend vers 0.

Remarque 3.2 *En utilisant le fait que* $e^{in_\alpha(\lambda;h)\frac{x\cdot\omega}{h}}$ *est une valeur propre généralisée de* $-h^2\Delta_x$ *et* ϕ_α *une valeur propre de* P^a*, on obtient (la dépendance en* h *est omise)*

$$\begin{aligned} I_a e_\alpha &= (P-\lambda)e_\alpha \quad et \\ V^{AD}e_\alpha &= \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha + \lambda(\Pi-\Pi_0)e_\alpha \;=\; (P^{AD}-\lambda)e_\alpha. \end{aligned}$$

Détaillons la deuxième égalité (l'autre est claire). Avec $\hat{\Pi} = 1-\Pi$,

$$\begin{aligned} P^{AD}e_\alpha &= \Pi(-h^2\Delta_x)\Pi e_\alpha + \Pi(P^a+I_a)e_\alpha \\ &= n_\alpha(\lambda;h)^2\Pi e_\alpha + \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha + \Pi E_\alpha e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha \\ &= \lambda\Pi e_\alpha + \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha \\ &= \lambda e_\alpha - \lambda\hat{\Pi}e_\alpha + \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha + \Pi I_a e_\alpha \end{aligned}$$

$$\text{et} \quad V^{AD}e_\alpha \;=\; (P^{AD}-P_a)e_\alpha \;=\; P^{AD}e_\alpha - (-h^2\Delta_x + E_\alpha)e_\alpha \;=\; P^{AD}e_\alpha - \lambda e_\alpha.$$

Les trois termes constituant $V^{AD}e_\alpha$ sont $O(\langle x\rangle^{-\rho})$ (cf. Proposition 3.1) mais

$$\lambda(\Pi-\Pi_0)e_\alpha \;=\; -\lambda\hat{\Pi}\Pi_0 e_\alpha \;=\; -\lambda\hat{\Pi}e_\alpha$$

se distingue des deux autres car, si λ n'est pas une valeur propre de P^{AD},

$$R^{AD}(\lambda\pm i0)\lambda(\Pi-\Pi_0)e_\alpha \;=\; \hat{\Pi}e_\alpha. \tag{3.2}$$

Comme $\Pi\hat{\Pi}=0$, $\hat{\Pi}$ est auto-adjoint, (2.16) devient, grâce à (3.2),

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h) \;=\; \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)}\,\Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi V^{AD}e_\alpha\;,\;\Pi V^{AD}e_\alpha\Big\rangle. \tag{3.3}$$

Soient $\delta>0$ et $\eta=(1+\delta)\gamma$. On considère $\sum_{j=1}^3\chi_j = 1$ une partition de l'unité sur $I\!R^n$, dépendante de h avec, pour $1\leq j\leq 3$, $\chi_j\in C^\infty(I\!R^n;I\!R)$, $0\leq\chi_j\leq 1$ et

$$\begin{array}{lll} \mathrm{supp}\chi_1 \subset \{|x|<2h^{-\gamma}\} & , \ \chi_1 = 1 & \text{sur} \ \ \{|x|<h^{-\gamma}\}, \\ \mathrm{supp}\chi_2 \subset C_{\gamma\eta}\equiv\{h^{-\gamma}<|x|<3h^{-\eta}\} & , \ \chi_2 = 1 & \text{sur} \ \ \{2h^{-\gamma}<|x|<2h^{-\eta}\}, \\ \mathrm{supp}\chi_3 \subset \{|x|>2h^{-\eta}\}. & & \end{array}$$

On impose de plus qu'uniformément en h,

$$\forall\alpha\in I\!N^n,\ \exists D_\alpha>0;\ \forall j\in\{1,2,3\},\ |\partial_x^\alpha\chi_j(x)| \;\leq\; D_\alpha\langle x\rangle^{-|\alpha|} \tag{3.4}$$

Ceci est possible car les ensembles $\{x;\ \chi_j(x)=0\}$ et $\{x;\ \chi_j(x)=1\}$ s'éloignent l'un de l'autre quand $h\to 0$. On décompose les deux sections de la façon suivante

$$\sigma_\alpha(\lambda,\omega;h) \;=\; \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)}\sum_{1\leq j,k\leq 3}\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h), \tag{3.5}$$

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h) \;=\; \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)}\sum_{1\leq j,k\leq 3}\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h), \tag{3.6}$$

avec, pour $j, k \in \{1,2,3\}$, d'après (3.3),

$$\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h) \;=\; \Im\Big\langle R(\lambda+i0;h)\chi_j I_a e_\alpha \;,\; \chi_k I_a e_\alpha\Big\rangle,$$

$$\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) \;=\; \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_j \Pi V^{AD} e_\alpha \;,\; \chi_k \Pi V^{AD} e_\alpha\Big\rangle.$$

Proposition 3.3 *Si $\chi, \theta \in C_0^\infty(I\!R^n; I\!R)$ et $\lambda \in J$, alors*

$$R(\lambda\pm i0;h)\chi I_a e_\alpha \;=\; \chi e_\alpha + R(\lambda\pm i0;h)[\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha,$$

$$R^{AD}(\lambda\pm i0;h)\chi V^{AD} e_\alpha \;=\; \chi e_\alpha + R^{AD}(\lambda\pm i0;h)\Pi[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha,$$

$$\begin{aligned}
&\Im\Big\langle R(\lambda\pm i0;h)\chi I_a e_\alpha \;,\; \theta I_a e_\alpha\Big\rangle + \Im\Big\langle R(\lambda\pm i0;h)\theta I_a e_\alpha \;,\; \chi I_a e_\alpha\Big\rangle \\
&\quad= \Im\Big\langle R(\lambda\pm i0;h)[\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha \;,\; [\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha\Big\rangle \\
&\quad+ \Im\Big\langle R(\lambda\pm i0;h)[\theta, -h^2\Delta_x]e_\alpha \;,\; [\chi, -h^2\Delta_x]e_\alpha\Big\rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Im\Big\langle R^{AD}(\lambda\pm i0;h)\chi V^{AD} e_\alpha \;,\; \theta V^{AD} e_\alpha\Big\rangle + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda\pm i0;h)\theta V^{AD} e_\alpha \;,\; \chi V^{AD} e_\alpha\Big\rangle \\
&\quad= \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda\pm i0;h)\Pi[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha \;,\; \Pi[\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\Big\rangle \\
&\quad+ \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda\pm i0;h)\Pi[\theta, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha \;,\; \Pi[\chi, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\Big\rangle.
\end{aligned}$$

Démonstration : Elle s'appuie essentiellement sur la Remarque 3.2, voir [Jec-1]. □

Démonstration (du Théorème 2.4) : La preuve découle de plusieurs lemmes répartis sur cinq étapes. On n'écrira pas toujours la dépendance en h.

Première étape : On écarte des termes négligeables.

Lemme 3.4 *Si l'un des indices est 3 alors il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$,*

$$\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) \;=\; O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}) \quad \textit{et}$$

$$\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h) - \sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) \;=\; O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}).$$

Démonstration : Soient $1/2 < s' < s < \rho - n/2$, on a, d'après la Proposition 3.1,

$$\begin{aligned}
\Big\|\langle x\rangle^{s'}\chi_2 I_a e_\alpha\Big\| &\leq C\Big\|\langle x\rangle^{-n/2-(s-s')}1\!\!1_{\mathrm{supp}\chi_2}(x)\langle x\rangle^{n/2+s-\rho}\Big\| \\
&= O(h^{\gamma(\rho-n/2-s)}) \;=\; O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})
\end{aligned} \tag{3.7}$$

car $\langle x\rangle^{-n/2-(s-s')} \in L^2(I\!R_x^n)$ et $\gamma\rho = 1+\gamma$. Comme

$$\Pi[-h^2\Delta_x, \Pi]e_\alpha \;=\; -h^2\Pi(\Delta_x\Pi)e_\alpha - 2in_\alpha(\lambda;h)h\Pi(\nabla_x\Pi)\cdot\omega e_\alpha,$$

$$\begin{aligned}\Big\|\langle x\rangle^{s'}\chi_2\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha\| &\leq Ch\|\langle x\rangle^{-n/2-(s-s')}\mathbb{1}_{\mathrm{supp}\chi_2}(x)\langle x\rangle^{n/2+s-\rho-1}\Big\|\\ &= O(h^{1+\gamma(\rho+1-n/2-s)}) = O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)}),\end{aligned}\tag{3.8}$$

toujours grâce à la Proposition 3.1. D'après la Remarque 3.2,

$$\begin{aligned}\Pi V^{AD}e_\alpha &= \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha+\Pi I_a e_\alpha\\ \text{et}\quad \Big\|\langle x\rangle^{s'}\chi_2\Pi V^{AD}e_\alpha\Big\| &= O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}).\end{aligned}$$

De même, comme $\eta=(1+\delta)\gamma$, on obtient

$$\Big\|\langle x\rangle^{s'}\chi_3 I_a e_\alpha\Big\| = O(h^{\eta(\rho-n/2-s)}) = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)}),\tag{3.9}$$

$$\Big\|\langle x\rangle^{s'}\chi_3\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha\Big\| = O(h^{1+\eta(\rho+1-n/2-s)}) = O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)+\delta\gamma(\rho+1-n/2-s)})$$

$$\text{et}\quad \Big\|\langle x\rangle^{s'}\chi_3\Pi V^{AD}e_\alpha\Big\| = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)}).$$

D'après (2.8), on a donc, pour $j,k\in\{2,3\}$, $(j,k)\neq(2,2)$,

$$\begin{aligned}\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= O(h^{-1})O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\end{aligned}$$

avec $\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)>0$ pour s assez proche de $1/2$. Grâce à (2.10),

$$\begin{aligned}\Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0;h)-R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big\}\chi_j I_a e_\alpha\ ,\ \chi_k I_a e_\alpha\Big\rangle &= O(h^0)O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\\ &\quad O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})\\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)})\end{aligned}$$

et les autres termes de la différence $\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ sont du type

$$\begin{aligned}\Im\Big\langle\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_j\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha\ ,\ \chi_k I_a e_\alpha\Big\rangle &= O(h^{-1})O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})\\ &\quad O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)})\\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(1-2s)}).\end{aligned}$$

Il reste donc à estimer les termes faisant intervenir χ_1 et χ_3. Pour cela, on transforme l'expression de $R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_1 V^{AD}e_\alpha$ en utilisant la Proposition 3.3. On en déduit que

$$\begin{aligned}\sigma_{13}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= \Im\Big\langle\chi_1 e_\alpha\ ,\ \chi_3 V^{AD}e_\alpha\Big\rangle+\Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\ ,\ \chi_3 V^{AD}e_\alpha\Big\rangle,\\ &= \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\ ,\ \chi_3 V^{AD}e_\alpha\Big\rangle\end{aligned}$$

car $\chi_1\chi_3=0$. Pour évaluer ce dernier terme, calculons

$$[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha = \Big(h^2(\Delta\chi_1)\Pi+2h(\nabla\chi_1)\cdot h(\nabla_x\Pi)+2in_\alpha(\lambda;h)h(\nabla\chi_1)\cdot\omega\Pi\Big)e_\alpha.$$

D'après les propriétés de χ_1, notamment (3.4),

$$\left\| \langle x\rangle^{s'}[\chi_1, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha \right\| = O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)})$$

$$\begin{aligned} \text{et} \quad \sigma_{13}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= O(h^{-1+1+\gamma(1-n/2-s)+1+\gamma(1-n/2-s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)}) \\ &= O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)}), \end{aligned}$$

avec $\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)>0$ pour s assez proche de $1/2$. L'étude de $\sigma_{31}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ est similaire en utilisant l'expression de $R^{AD}(\lambda-i0;h)\chi_1 V^{AD}e_\alpha$ de la Proposition 3.3.

On étudie maintenant la différence $\sigma_{jk}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ pour $(j,k)=(1,3)$ (ce sera analoque pour $(j,k)=(3,1)$). D'après la Proposition 3.3,

$$\sigma_{13}(\lambda,\omega;h) = \Im\Big\langle R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_3 I_a e_\alpha\Big\rangle$$

On est donc ramené à estimer la différence

$$\Im\Big\langle R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_3 I_a e_\alpha\Big\rangle - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha \ , \ \chi_3 V^{AD}e_\alpha\Big\rangle$$

$$\begin{aligned} = \ & \Im\Big\langle R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_3 I_a e_\alpha\Big\rangle - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_3 V^{AD}e_\alpha\Big\rangle \\ & -\Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big[[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi\Big]e_\alpha \ , \ \chi_3 V^{AD}e_\alpha\Big\rangle. \end{aligned}$$

Le dernier terme est d'ordre (en h)

$$1+\gamma(1-n)+2+2\gamma+\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)$$

car $\Big[[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi\Big] = 2h(\nabla\chi_1)\cdot h(\nabla_x\Pi)$. Il s'agit donc d'évaluer la quantité

$$\begin{aligned} & \Im\Big\langle \Big\{R(\lambda+i0;h)-R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big\}[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_3 I_a e_\alpha\Big\rangle \\ & -\Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_3[-h^2\Delta_x,\Pi]e_\alpha\Big\rangle. \end{aligned}$$

D'après les arguments précédents, ces deux termes sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)$$

avec $\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s)>0$ pour s assez proche de $1/2$.□

Deuxième étape: En rappelant que $I_a^0(x)=I_a(x;h)|_{y=0}$ et $n_\alpha(\lambda)=n_\alpha(\lambda;0)$, on pose

$$f_1 = 2in_\alpha(\lambda)h(\nabla\chi_1)\cdot\omega \quad \text{et} \quad f_2=\chi_2 I_a^0. \tag{3.10}$$

Lemme 3.5 *Il existe $\epsilon_0>0$ tel que, pour $1\leq j,k\leq 2$, uniformément sur $J\times S^{n-1}$,*

$$\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) = \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi f_j e_\alpha \ , \ f_k e_\alpha\Big\rangle + O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}),$$

$$\begin{aligned} \sigma_{jk}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{jk}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= \Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0;h)-R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big\}f_j e_\alpha \ , \ f_k e_\alpha\Big\rangle \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}). \end{aligned}$$

Démonstration : Commençons par σ_{11}^{AD}. D'après la Proposition 3.3,

$$\sigma_{11}^{AD}(\lambda,\omega;h) \;=\; \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\;,\;[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\Big\rangle.$$

En écrivant

$$[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha \;=\; f_1\Pi e_\alpha - 2ih(\nabla\chi_1)\cdot ih(\nabla_x\Pi)e_\alpha + h^2(\Delta\chi_1)\Pi e_\alpha + 2ih\Big(n_\alpha(\lambda;h)-n_\alpha(\lambda)\Big)\Pi e_\alpha$$

et en utilisant (3.4), la Proposition 3.1 et $n_\alpha(\lambda;h)-n_\alpha(\lambda)=O(h^2)$,

$$\sigma_{11}^{AD}(\lambda,\omega;h) - \Im\Big\langle \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)f_1e_\alpha\;,\;f_1e_\alpha\Big\rangle$$

$$=\; O(h^{-1+1+\gamma(1-n/2-s)+2+\gamma(1-n/2-s)+\min(1,\gamma)}) \;=\; O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\min(1,\gamma)})$$

avec $\gamma(1-2s)+1+\min(1,\gamma)>0$ pour s assez proche de $1/2$. De plus, toujours grâce à la Proposition 3.3, $\sigma_{11}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{11}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ est

$$\begin{aligned}
&= \Im\Big\langle R(\lambda+i0;h)[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha\;,\;[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha\Big\rangle\\
&\quad - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\;,\;[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\Big\rangle\\
&= \Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0;h)-R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big\}[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha\;,\;[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha\Big\rangle\\
&\quad - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big[[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi\Big]e_\alpha\;,\;[\chi_1,-h^2\Delta_x]e_\alpha\Big\rangle\\
&\quad - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\;,\;\Big[[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi\Big]e_\alpha\Big\rangle
\end{aligned}$$

avec $\Big\|\langle x\rangle^{\rho+2}\Big[[\chi_1,-h^2\Delta_x],\Pi\Big]\Big\| \;=\; O(h^2)$ d'après la Proposition 3.1. Les deux derniers termes sont donc d'ordre

$$-1+1+\gamma(1-n/2-s)+2+\gamma(\rho+2-n/2-s) \;=\; 1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+2+2\gamma.$$

Quant au premier terme, on l'estime comme précédemment avec un gain en h dû à la différence des résolvantes (cf. (2.10)). Il est d'ordre $1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+2+\min(1,\gamma)$ en h, après retrait du terme

$$\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0;h)-\Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\Big\}f_1e_\alpha\;,\;f_1e_\alpha\Big\rangle.$$

Passons au cas où $(j,k)=(2,2)$. On a

$$\begin{aligned}
\sigma_{22}^{AD}(\lambda,\omega;h) &= \Im\Big\langle \Pi R^{AD}(\lambda+i0;h)\chi_2V^{AD}e_\alpha\;,\;\chi_2V^{AD}e_\alpha\Big\rangle\\
&= \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\chi_2I_ae_\alpha\;,\;\chi_2I_ae_\alpha\Big\rangle\\
&\quad + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]\Pi e_\alpha\;,\;\chi_2I_ae_\alpha\Big\rangle\\
&\quad + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\chi_2I_ae_\alpha\;,\;\chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]\Pi e_\alpha\Big\rangle\\
&\quad + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]\Pi e_\alpha\;,\;\chi_2[-h^2\Delta_x,\Pi]\Pi e_\alpha\Big\rangle.
\end{aligned}$$

Les trois derniers termes sont d'ordre

$$-1+1+\gamma(\rho+1-n/2-s)+\gamma(\rho-n/2-s) \ = \ 1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma.$$

Le potentiel inter-amas I_a est composé de potentiels du type $V(x-L(y)-L_h(y))$, où V vérifient (D_ρ) pour $\rho>1$ et où les applications $L, L_h : I\!R^{nN} \longrightarrow I\!R^n$ sont linéaires et vérifient $\|L\| = O(h^0)$ et $\|L_h\| = O(h^2)$. Par la formule de Taylor,

$$V\Big(x-L(y)-L_h(y)\Big)-V(x) = -\int_0^1 (\nabla V)\Big(x-tL(y)-tL_h(y)\Big)\cdot\Big(L(y)+L_h(y)\Big)dt. \quad (3.11)$$

Comme la fonction $y\mapsto \Big(L(y)+L_h(y)\Big)\phi_\alpha(y;h)$ appartient à $L^2(I\!R_y^{nN})$ et que sa norme est uniformément bornée en h (d'après la décroissance exponentielle des fonctions propres, cf. Proposition 3.1),

$$\Big\|\Big(I_a(x)-I_a^0(x)\Big)e_\alpha\Big\|_{L^2(I\!R_y^{nN})} = O(\langle x\rangle^{-\rho-1}),$$

uniformément en h. Ainsi, on a une petite amélioration en h

$$\Big\|\langle x\rangle^{s'}\chi_2(I_a-I_a^0)e_\alpha\Big\| \ = \ O(h^{\gamma(\rho+1-n/2-s})\ = \ O(h^{1+\gamma(2-n/2-s)}), \qquad (3.12)$$

pour $1/2<s'<s<\rho-n/2$, par rapport à (3.7). On en déduit donc

$$\Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\chi_2 I_a e_\alpha\ ,\ \chi_2 I_a e_\alpha\Big\rangle - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\chi_2 I_a^0 e_\alpha\ ,\ \chi_2 I_a^0 e_\alpha\Big\rangle$$
$$= \ O(h^{-1+1+\gamma(1-n/2-s)+1+\gamma(2-n/2-s)}) \ = \ O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+\gamma}) \text{ et}$$
$$\sigma_{22}^{AD}(\lambda,\omega;h) \ = \ \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\chi_2 I_a^0 e_\alpha\ ,\ \chi_2 I_a^0 e_\alpha\Big\rangle \ + \ O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma}).$$

L'étude de la différence $\sigma_{22}(\lambda,\omega;h)-\sigma_{22}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ se ramène donc à la différence

$$\begin{aligned} &\Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0;h)-R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big\}\chi_2 I_a e_\alpha\ ,\ \chi_2 I_a e_\alpha\Big\rangle \\ &-\Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0;h)-R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big\}\chi_2 I_a^0 e_\alpha\ ,\ \chi_2 I_a^0 e_\alpha\Big\rangle \\ = \quad &\Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0;h)-R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big\}\chi_2 (I_a-I_a^0) e_\alpha\ ,\ \chi_2 I_a e_\alpha\Big\rangle \\ &+\Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0;h)-R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi\Big\}\chi_2 I_a^0 e_\alpha\ ,\ \chi_2 (I_a-I_a^0) e_\alpha\Big\rangle. \end{aligned}$$

D'après (2.10), ce terme est d'ordre

$$0+\gamma(\rho+1-n/2-s)+\gamma(\rho-n/2-s) = 1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+1+\gamma$$

avec $\gamma(1-2s)+\gamma>0$ pour s assez proche de $1/2$.

Examinons maintenant $\sigma_{12}^{AD}(\lambda,\omega;h)+\sigma_{21}^{AD}(\lambda,\omega;h)$ qui vaut, d'après la Proposition 3.3,

$$= \ \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0;h)\Pi[\chi_1,-h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha\ ,\ \chi_2 V^{AD}e_\alpha\Big\rangle \ + \ \Im\Big\langle\chi_1\chi_2\Pi e_\alpha\ ,\ V^{AD}e_\alpha\Big\rangle$$

$$+ \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi\chi_2 V^{AD} e_\alpha \ , \ [\chi_1, -h^2\Delta_x]\Pi e_\alpha \Big\rangle \ + \ \Im\Big\langle V^{AD} e_\alpha \ , \ \chi_1\chi_2\Pi e_\alpha \Big\rangle$$

où la somme des deuxième et quatrième termes est nulle puisque $\Pi V^{AD} e_\alpha = \Pi(P^{AD} - \lambda)e_\alpha$ et $\Pi(P^{AD} - \lambda)$ est symétrique. Le premier terme (le troisième se traite de même) est

$$= \ \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi[\chi_1, -h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_2 V^{AD} e_\alpha \Big\rangle \ + \ O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-2s)+2+2\gamma})$$

et le nouveau premier terme s'écrit

$$\begin{aligned}
= \quad & \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi f_1 e_\alpha \ , \ f_2 e_\alpha \Big\rangle \qquad (3.13)\\
& + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi f_1 e_\alpha \ , \ \chi_2(I_a - I_a^0)e_\alpha \Big\rangle\\
& + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi f_1 e_\alpha \ , \ \chi_2[-h^2\Delta_x, \Pi]e_\alpha \Big\rangle\\
& + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi f_1 e_\alpha \ , \ 2ih(\nabla\chi_1 \cdot \omega)\Big(n_\alpha(\lambda; h) - n_\alpha(\lambda)\Big)\Pi e_\alpha \Big\rangle\\
& + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi\Big(-h^2(\Delta\chi_1)\Big)e_\alpha \ , \ f_2 e_\alpha \Big\rangle\\
& + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi\Big(-h^2(\Delta\chi_1)\Big)e_\alpha \ , \ \chi_2(I_a - I_a^0)e_\alpha \Big\rangle\\
& + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi\Big(-h^2(\Delta\chi_1)\Big)e_\alpha \ , \ \chi_2[-h^2\Delta_x, \Pi]e_\alpha \Big\rangle.\\
& + \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi\Big(-h^2(\Delta\chi_1)\Big)e_\alpha \ , \ 2ih(\nabla\chi_1 \cdot \omega)\Big(n_\alpha(\lambda; h) - n_\alpha(\lambda)\Big)\Pi e_\alpha \Big\rangle.
\end{aligned}$$

Les sept derniers termes sont d'ordre $1 + \gamma(1 - n) + \gamma(1 - 2s) + \min(1, \gamma)$. Pour terminer, considérons la différence

$$\Big(\sigma_{12}(\lambda, \omega; h) + \sigma_{21}(\lambda, \omega; h)\Big) \ - \ \Big(\sigma_{12}^{AD}(\lambda, \omega; h) + \sigma_{21}^{AD}(\lambda, \omega; h)\Big).$$

D'après la Proposition 3.3, $\sigma_{12}(\lambda, \omega; h) + \sigma_{21}(\lambda, \omega; h)$ s'écrit

$$\Im\Big\langle R(\lambda + i0; h)[\chi_1, -h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_2 I_a e_\alpha \Big\rangle \ + \ \Im\Big\langle R(\lambda + i0; h)\chi_2 I_a e_\alpha \ , \ [\chi_1, -h^2\Delta_x]e_\alpha \Big\rangle.$$

En procédant comme précédemment, on est ramené à estimer la différence

$$\Im\Big\langle R(\lambda + i0; h)[\chi_1, -h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_2 I_a e_\alpha \Big\rangle - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi[\chi_1, -h^2\Delta_x]e_\alpha \ , \ \chi_2 V^{AD} e_\alpha \Big\rangle,$$

que l'on décompose comme dans (3.13). En utilisant (2.10) chaque terme est d'ordre $1 + \gamma(1 - n) + 1 + \epsilon_0$ en h pour un $\epsilon_0 > 0$. $\square$

Troisième étape : Pour $j \in \{1, 2\}$, uniformément en h,

$$\text{supp} f_j \subset C_{\gamma\eta} \ = \ \{h^{-\gamma} < |x| < 3h^{-\eta}\} \qquad (3.14)$$

$$\text{et} \quad |f_j(x)| \ = \ O(\langle x\rangle^{-\rho}). \qquad (3.15)$$

L'inclusion (3.14) provient des propriétés de support de χ_1 et χ_2. La propriété (3.15) est claire pour f_2, vérifions-la pour f_1. D'après la décroissance de $\nabla\chi_1$ en x (cf. (3.4)), uniformément en h, il existe une constante $c > 0$ telle que, pour tout x et tout h,

$$\left|\langle x\rangle^\rho f_1(x)\right| \leq 2n_\alpha(\lambda)h\left|\langle x\rangle^{\rho-1}\mathbb{1}_{\{|x|<2h^{-\gamma}\}}(x)\right| \left|\langle x\rangle(\nabla\chi_1)(x)\right| \leq ch^{1-\gamma(\rho-1)} = c.$$

Soit $H_\omega = \{x \in I\!R^n;\ x\cdot\omega = 0\}$ l'hyperplan vectoriel orthogonal à ω. Pour tout $x \in I\!R^n$, on peut écrire de manière unique $x = x_\omega + (x\cdot\omega)\omega$, où $x_\omega \in H_\omega$ est le paramètre d'impact. Soit $\kappa = (1-2\delta)\gamma$ ($\delta > 0$ assez petit). On introduit une nouvelle partition de l'unité, sur $I\!R^{n-1}$ cette fois. Soient $\theta_1, \theta_2 \in C^\infty(I\!R^{n-1}; I\!R)$ telles que

$$\begin{array}{rcl} \theta_1 + \theta_2 = 1 & , & 0 \leq \theta_1, \theta_2 \leq 1 \\ \theta_1(u) = 1 \text{ si } |u| < 1 & \text{et} & \mathrm{supp}\theta_1 \subset \{|u| \leq 2\} \end{array}$$

On pose, pour $j, k \in \{1, 2\}$,

$$f_{jk}(x) = \theta_j(h^\kappa x_\omega)f_k(x). \tag{3.16}$$

Lemme 3.6 *Dès que $j = 1$ ou $l = 1$, il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément sur $J \times S^{n-1}$,*

$$\Im\left\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi f_{jk}e_\alpha\ ,\ f_{lm}e_\alpha\right\rangle \ = \ O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}),$$

$$\Im\left\langle\left\{R(\lambda + i0; h) - R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi\right\}f_{jk}e_\alpha\ ,\ f_{lm}e_\alpha\right\rangle = O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}).$$

Démonstration : Par (3.14), le volume du support de f_{1k} ($k \in \{1; 2\}$) est un $O(h^{-\eta-(n-1)\kappa}) = O(h^{-n\gamma+\delta\gamma(2n-3)})$, ce qui donne l'amélioration

$$\begin{aligned} \left\|\langle x\rangle^{s'} f_{1k}e_\alpha\right\| \leq c\left\|\langle x\rangle^{(s'-\rho)}\mathbb{1}_{\mathrm{supp}f_{1k}}(x)\right\| \ &= \ O(h^{\gamma(\rho-s')-\gamma n/2+\delta\gamma(n-3/2)}) \\ &= \ O(h^{1+\gamma(1-n/2-s')+\delta\gamma(n-3/2)}) \end{aligned} \tag{3.17}$$

par rapport à

$$\left\|\langle x\rangle^{s'} f_{1k}e_\alpha\right\| \ = \ O(h^{\gamma(\rho-n/2-s)}) \ = \ O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}). \tag{3.18}$$

Si $j = 1$ ou $l = 1$, on a donc

$$\Im\left\langle\Pi R^{AD}(\lambda + i0; h)f_{jk}e_\alpha\ ,\ f_{lm}e_\alpha\right\rangle \ = \ O(h^{1+\gamma(1-n)+\gamma(1-s-s')+\delta\gamma(n-3/2)})$$

avec $\gamma(1-s-s')+\delta\gamma(n-3/2) > 0$ pour s et s' assez proches de $1/2$ (car $n \geq 2$). Profitant du gain en h dans (2.10), on trouve de même le second résultat. □

Quatrième étape : Il reste donc à évaluer

$$\Im\left\langle R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi f_{2k}e_\alpha\ ,\ f_{2j}e_\alpha\right\rangle$$

$$\text{et}\quad \Im\left\langle\left\{R(\lambda + i0; h) - R^{AD}(\lambda + i0; h)\Pi\right\}f_{2k}e_\alpha\ ,\ f_{2j}e_\alpha\right\rangle$$

pour $j, k \in \{1,2\}$. Pour $j \in \{1,2\}$, on pose

$$g_j(x) = \int_0^{+\infty} f_{2j}(x - 2n_\alpha(\lambda)t\omega)e^{-ih^{-1}\int_0^t I_a^0(x-2n_\alpha(\lambda)(t-s)\omega)ds}dt.$$

D'après (3.14), on intègre en fait sur un compact donc la fonction g_j est bien définie et est C^∞. Par la suite, on va utiliser les propriétés suivantes des g_j.

Proposition 3.7 *Pour $j \in \{1,2\}$, uniformément en x et h,*

$$\begin{aligned} \mathrm{supp} g_j &\subset \Big\{h^{-\kappa} < |x_\omega| < 3h^{-\eta}\Big\}, && (3.19)\\ \Big|g_j(x)\Big| + \Big|(\nabla g_j)(x)\Big| &\leq O\Big((h^{-\gamma} + |x_\omega|)^{1-\rho}\Big), && (3.20)\\ \Big|(\nabla g_j)(x)\Big| &= O(h^{\kappa\rho}), && (3.21)\\ \Big|(\Delta g_j)(x)\Big| &= O(h^{2\kappa\rho-1}), && (3.22)\\ 2n_\alpha(\lambda)\omega \cdot (\nabla g_j) + ih^{-1}I_a^0 g_j &= f_{2j}. && (3.23) \end{aligned}$$

Démonstration : la preuve est élémentaire, voir l'annexe E dans [Jec-1].□

Pour contrôler g_j en fonction de la variable dans la direction de ω, on introduit une nouvelle troncature $\chi_4(x) = \zeta(h^\eta x \cdot \omega)$, où $\zeta \in C_0^\infty(I\!R; I\!R)$ vérifie

$$\begin{aligned} \zeta(t) = 1 \quad &\text{si} \quad |t| \leq M - 1, \\ \mathrm{supp}\zeta \quad &\subset \quad \{t;\ |t| \leq M\}, \end{aligned}$$

pour un réel M grand devant 1. En particulier, uniformément en x et en h,

$$\Big|(\nabla\chi_4)(x)\Big| \leq ch^\eta, \ \Big|(\Delta\chi_4)(x)\Big| \leq ch^{2\eta}, \tag{3.24}$$

$\chi_4 = 1$ sur le support de f_{2j} d'après (3.14) et

$$\mathrm{supp}\chi_4 g_j \subset \Big\{x \in I\!R^n;\ |x| \leq Rh^{-\eta}\Big\} \tag{3.25}$$

pour $j \in \{1,2\}$ et un certain $R > M$. Dans le même esprit que dans la Proposition 3.3, on construit une approximation de $R(\lambda \pm i0; h)f_{2k}e_\alpha$ et de $R^{AD}(\lambda \pm i0; h)\Pi f_{2k}e_\alpha$.

Proposition 3.8 *Pour $j \in \{1,2\}$,*

$$\begin{aligned} R(\lambda \pm i0; h)f_{2j}e_\alpha &= ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha - R(\lambda \pm i0; h)r_j e_\alpha, \\ R^{AD}(\lambda \pm i0; h)\Pi f_{2j}e_\alpha &= ih^{-1}\Pi\chi_4 g_j e_\alpha - R^{AD}(\lambda \pm i0; h)\Pi r_j^{AD} e_\alpha, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \textit{avec} \quad r_j &= ih^{-1}[-h^2\Delta_x, \chi_4]g_j + ih^{-1}\chi_4(-h^2(\Delta g_j)) \\ &\quad + ih^{-1}\chi_4 g_j(I_a - I_a^0) - 2ih(\nabla g_j \cdot \omega)\Big(n_\alpha(\lambda; h) - n_\alpha(\lambda)\Big)e_\alpha \\ r_j^{AD} &= r_j + ih^{-1}[-h^2\Delta_x, \Pi]\chi_4 g_j. \end{aligned}$$

Démonstration : On a

$$\begin{aligned}\Pi(P^{AD}-\lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha) &= ih^{-1}\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi_4 g_j e_\alpha + \Pi(P-\lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha)\\[2ex] \text{et}\quad (P-\lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha) &= ih^{-1}(-h^2\Delta_x)\chi_4 g_j e_\alpha + ih^{-1}\chi_4 g_j(P^a+I_a-\lambda)e_\alpha,\\ &= ih^{-1}[-h^2\Delta_x,\chi_4]g_j e_\alpha + ih^{-1}\chi_4(-h^2\Delta_x)g_j e_\alpha\\ &\quad + ih^{-1}\chi_4 g_j(E_\alpha+I_a-\lambda)e_\alpha.\end{aligned}$$

Comme $n_\alpha(\lambda;h)=(\lambda-E_\alpha(h))^{1/2}$, on a, d'après (3.23),

$$\begin{aligned}(-h^2\Delta_x)g_j e_\alpha + g_j(E_\alpha+I_a-\lambda)e_\alpha &= -h^2(\Delta g_j)e_\alpha + g_j(I_a-I_a^0)e_\alpha\\ &\quad -ihf_{2j}e_\alpha - 2ih(\nabla g_j\cdot\omega)\Big(n_\alpha(\lambda;h)-n_\alpha(\lambda)\Big)e_\alpha.\end{aligned}$$

En appliquant la valeur au bord de la résolvante correspondante aux expressions de $\Pi(P^{AD}-\lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha)$ et $(P-\lambda)(ih^{-1}\chi_4 g_j e_\alpha)$, on trouve les résultats annoncés car la fonction χ_4 vaut 1 sur le support de f_{2j}.$\square$

Lemme 3.9 *Il existe $\epsilon_0>0$ tel que, pour $j,k\in\{1,2\}$, uniformément sur $J\times S^{n-1}$,*

$$\begin{aligned}\Big\langle \Pi R^{AD}(\lambda\pm i0;h)r_j e_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle &= O(h^{1+\gamma(1-n)+\epsilon_0}),\\ \Big\langle \Pi R^{AD}(\lambda\pm i0;h)(r_j^{AD}-r_j)e_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle &= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0})\\ \textit{et}\quad \Big\langle\Big\{R^{AD}(\lambda\pm i0;h)\Pi - R(\lambda\pm i0;h)\Big\}r_j e_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle &= O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}).\end{aligned}$$

Démonstration : On évalue successivement la contribution des termes constituant r_j^{AD} dans l'expression $\Big\langle R^{AD}(\lambda\pm i0;h)\Pi r_j^{AD}e_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle$.

Pour $1/2<s'<s<\rho-n/2$, s et s' assez proches de $1/2$,

$$\begin{aligned}\Big\|\langle x\rangle^{s'}h^{-1}\chi_4 g_j(I_a-I_a^0)e_\alpha\Big\| &\le Ch^{-1}\Big\|\langle x\rangle^{s'-\rho-1}\mathbb{1}_{\mathrm{supp}\chi_4 g_j}(x)\Big\|O(h^{\gamma(\rho-1)})\\ &\le C\Big\|\langle x\rangle^{-n/2-(s-s')} < x_\omega >^{n/2+s-\rho-1}\ \mathbb{1}_{\mathrm{supp}\chi_4 g_j}(x)\Big\|\\ &\le O(h^{\kappa(\rho+1-n/2-s)}),\end{aligned}$$

d'après (3.19) et (3.20). Par conséquent, d'après (3.18), le terme correspondant est d'ordre

$$-1+\gamma(\rho-n/2-s)+\kappa(\rho+1-n/2-s)\ =\ 1+\gamma(1-n)+\gamma+\gamma(1-2s)-2\delta\gamma(\rho+1-n/2-s)$$

avec $\gamma+\gamma(1-2s)-2\delta\gamma(\rho+1-n/2-s)>0$ pour s assez proche de $1/2$ et δ assez petit. D'après la Proposition 3.1, on a de même

$$\Big\|\langle x\rangle^{s'}h^{-1}\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi_4 g_j e_\alpha\Big\|\ =\ O(h^{\kappa(\rho+1-n/2-s)+\gamma(\rho-1)})$$

grâce à (3.24), (3.19) et (3.20). Le terme correspondant est donc d'ordre au moins 1 de plus que le précédent, c'est-à-dire $1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0$, ce qui donne la deuxième estimation.

D'après (3.22) et (3.25),

$$\left\|\langle x\rangle^{s'}h\chi_4(\Delta g_j)e_\alpha\right\| \leq ch^{2\kappa\rho}\left(\int_{|x|<Rh^{-\eta}}\langle x\rangle^{2s'}dx\right)^{1/2} \; = \; O(h^{2\kappa\rho-(n/2+s')\eta}).$$

Le terme correspondant est d'ordre

$$-1+2\kappa\rho-(n/2+s')\eta+\gamma(\rho-n/2-s) \; = \; 1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(1-s-s')-\delta\gamma(4\rho+n/2+s'),$$

où $1+\gamma+\gamma(1-s-s')-\delta\gamma(4\rho+n/2+s')>0$ pour δ petit et s proche de $1/2$. De même,

$$\left\|\langle x\rangle^{s'}\chi_4(\nabla g_j\cdot\omega)\Big(n_\alpha(\lambda;h)-n_\alpha(\lambda)\Big)e_\alpha\right\| \; = \; O(h^{2+\kappa\rho-(n/2+s')\eta}),$$

d'après (3.21), donnant une contribution d'ordre $1+\gamma(1-n)+2+\gamma(1-s-s')-\delta\gamma(2\rho+n/2+s')$ avec $2+\gamma(1-s-s')-\delta\gamma(2\rho+n/2+s')>0$ pour δ petit et s proche de $1/2$.

En vertu de (3.21) et (3.24), on voit que

$$\left\|\langle x\rangle^{s'}h(\nabla\chi_4)\cdot(\nabla g_j)e_\alpha\right\| = O(h^{1+\kappa\rho+\eta(1-n/2-s')})$$

si bien que le terme correspondant est d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(1-s-s')-\delta\gamma(2\rho-1+n/2+s'),$$

avec $1+\gamma+\gamma(1-s-s')-\delta\gamma(2\rho+n/2+s')>0$ pour δ petit et s proche de $1/2$. On montre de même que la contribution du terme $h(\Delta\chi_4)g_je_\alpha$ est négligeable. Il reste donc à évaluer celle de $r_{j0}e_\alpha\equiv(\nabla\chi_4\cdot\omega)g_je_\alpha$. Les arguments précédents donnent l'estimation

$$\left\|\langle x\rangle^{s'}r_{j0}e_\alpha\right\| = O(h^{1+\eta(1-n/2-s')}) \tag{3.26}$$

ce qui est insuffisant. Comme dans [RT], on veut profiter du fait que les fonctions intervenant dans le produit scalaire

$$\Big\langle \Pi R^{AD}(\lambda\pm i0;h)r_{j0}e_\alpha\;,\;f_{2k}e_\alpha\Big\rangle$$

ont des supports bien séparés. Pour ce faire, on va remplacer la résolvante adiabatique par celle de $P^a(h)$: $R_a(z;h)\equiv(P^a(h)-z)^{-1}$ qui vérifie, pour $\chi_0=\chi_1+\chi_2=1-\chi_3$,

$$\left\|\chi_0\langle x\rangle^{-s}R_a(\lambda\pm i0;h)r_{j0}e_\alpha\right\| = O(h^\infty), \tag{3.27}$$

$$\left\|\langle x\rangle^{-s}R_a(\lambda\pm i0;h)\Pi_0\langle x\rangle^{-s}\right\| = O(h^{-1}), \tag{3.28}$$

pour $s>1/2$ (cf. [RT]). Par la formule des résolvantes, on a

$$\Pi R^{AD}(z)\Pi_0 \; = \; \Pi R_a(z)\Pi_0+R^{AD}(z)\Pi\Big([-h^2\Delta_x,\Pi]+I_a\Big)(\chi_0+\chi_3)\Pi_0R_a(z). \tag{3.29}$$

Grâce à (3.27), il suffit de contrôler la contribution de χ_3. D'après la Proposition 3.1, (2.8), (3.26) et (3.28), cette contribution est d'ordre

$$\begin{aligned} & -1+\gamma(\rho-n/2-s)+\eta(\rho-2s)-1+1+\eta(1-n/2-s) \\ = & \; 1+\gamma(1-n)+2\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s+1-2s) \end{aligned}$$

avec $2\gamma(1-2s)+\delta\gamma(\rho-n/2-s+1-2s)>0$ pour s assez proche de $1/2$.

Pour obtenir la dernière estimation du Lemme 3.9, à l'exception de la contribution de $r_{j0}e_\alpha$, il suffit de reprendre les arguments précédents en tenant compte du fait que la différence des résolvantes est d'ordre 0 en h (cf. (2.10)). Pour cette dernière contribution, on suit les arguments précédents en utilisant la formule

$$\begin{aligned} \Big(R(z)-\Pi R^{AD}(z)\Big)\Pi_0 &= (\Pi_0-\Pi)R_a(z)\Pi_0+R^{AD}(z)\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi](\chi_0+\chi_3)\Pi_0R_a(z) \\ &\quad -\Big(R(z)-\Pi R^{AD}(z)\Big)(\chi_0+\chi_3)I_a\Pi_0R_a(z)\Pi_0 \end{aligned}$$

et l'estimation (2.10)).□

Cinquième et dernière étape: Grâce à $n_\alpha(\lambda;h)=n_\alpha(\lambda)+O(h^2)$, (3.5) et (3.6), il existe donc $\epsilon_0>0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda\in J$ et $\omega\in S^{n-1}$,

$$\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h) = \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda)}\sum_{1\le j,k\le 2}\Im\Big\langle ih^{-1}\Pi g_je_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle+O(h^{\gamma(1-n)+\epsilon_0}), \tag{3.30}$$

$$\sigma_\alpha(\lambda,\omega;h)-\sigma_\alpha^{AD}(\lambda,\omega;h) = \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda)}\sum_{1\le j,k\le 2}\Im\Big\langle ih^{-1}(\Pi-\Pi_0)g_je_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle+O(h^{\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}). \tag{3.31}$$

Les deux assertions (3.1) et (1.6), qui donnent le Théorème 2.4, découlent donc du

Lemme 3.10 *Pour* $1\le j,k\le 2$ *et uniformément par rapport à* $\lambda\in J$ *et* $\omega\in S^{n-1}$,

$$\Big\langle ih^{-1}(\Pi-\Pi_0)g_je_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle = O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma})$$

$$\text{et}\quad \Big\langle ih^{-1}\Pi_0g_je_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle = \Big\langle ih^{-1}g_j\ ,\ f_{2k}\Big\rangle = O(h^{1+\gamma(1-n)}).$$

Démonstration : D'après la Proposition 3.1 et les propriétés (3.19), (3.14) et (3.15),

$$\begin{aligned} \Big|\Big\langle ih^{-1}(\Pi-\Pi_0)g_je_\alpha\ ,\ f_{2k}e_\alpha\Big\rangle\Big| &= h^{-1}\Big|\int\Big\langle\Big(\Pi(x)-\Pi_0\Big)\phi_\alpha\ ,\ \phi_\alpha\Big\rangle_{L^2(\mathbf{R}_y^{nN})}g_j(x)f_{2k}(x)dx\Big| \\ &\le ch^{-1}\int(h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho}\langle x\rangle^{-2\rho}\mathbb{I}_{C_{\gamma\eta}}(x)dx \\ &\le c'h^{-1+\gamma(\rho-1)}\int_{h^{-\gamma}}^{+\infty}r^{-2\rho+n-1}dr=c'h^{\gamma(2\rho-n)}=O(h^{2+\gamma(2-n)}). \end{aligned}$$

De la même manière, on peut écrire

$$\left|\left\langle ih^{-1}g_j\ ,\ f_{2k}\right\rangle\right| \leq ch^{-1}\int (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{1-\rho}\langle x\rangle^{-\rho}\mathbb{1}_{C_{\gamma\eta}}(x)dx.$$

On effectue le changement de variable $x = x_\omega + s\omega$ et on intègre par rapport à s, en remarquant que $\rho > 1$ et que, sur $C_{\gamma\eta}$, $\sqrt{7}\langle x\rangle \geq |x_\omega| + h^{-\gamma} + |s|$. On a donc

$$\left|\left\langle ih^{-1}g_j\ ,\ f_{2k}\right\rangle\right| \leq c'h^{-1}\int (h^{-\gamma}+|x_\omega|)^{2-2\rho}dx_\omega \leq c"h^{-1}\int_0^{+\infty}(h^{-\gamma}+r)^{2-2\rho}r^{n-2}dr.$$

En posant $r = h^{-\gamma}t$, on trouve, avec une intégrale convergente (cf. $\rho > (n+1)/2$),

$$\left|\left\langle ih^{-1}g_j\ ,\ f_{2k}\right\rangle\right| \leq c"h^{-1+\gamma(2\rho-2)-\gamma(n-2)-\gamma}\int_0^{+\infty}(1+t)^{2-2\rho}t^{n-2}dt \ =\ O(h^{1+\gamma(1-n)}).\ \square$$

4 Preuve du Théorème 2.5

Pour démontrer le Théorème 2.5, on suit la stratégie de [I2] qui suit essentiellement la démarche de la partie 3. Ici aussi, il s'agît de contrôler l'influence de Π. Pour conserver une bonne cohérence de la démonstration, certains résultats de [I2] sont redémontrés. Comme dans partie 3, la preuve se décompose également en une série de lemmes. On utilise les résultats, les notations et en particulier la partition de l'unité de la partie 3 et on choisit $\chi \equiv 1-\chi_1 = \chi_2+\chi_3$. Dans les expressions (2.14) et (2.17), on va séparer les termes contenant une seule résolvante des autres (cf. (4.10)) et, pour ces derniers, exprimer la partie imaginaire (cf. (4.11)). D'après (2.11) et (2.15),

$$L_a \ =\ [-h^2\Delta_x,\chi]+\chi I_a \ \text{ et }\ \Pi L^{AD} \ =\ \Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi+\Pi L_a.$$

(on omet d'écrire la dépendance en h). On a donc $L_a e_\alpha = \phi_1+\phi_2$ avec

$$\begin{aligned}\phi_1 &= -2ihn_\alpha(\lambda)(\nabla\chi)\cdot\omega e_\alpha + \chi_2 I_a^0 e_\alpha, &(4.1)\\ \phi_2 &= -h^2(\Delta\chi)e_\alpha+\chi_2(I_a-I_a^0)e_\alpha &(4.2)\\ &\quad +\chi_3 I_a e_\alpha - 2ih\Big(n_\alpha(\lambda;h)-n_\alpha(\lambda)\Big)(\nabla\chi)\cdot\omega e_\alpha.\end{aligned}$$

Comme les opérateurs Π_β et I_a^0 commutent, on peut écrire

$$\chi\Pi_\beta(L_a)^* - L_a\Pi_\beta\chi = B_1+B_2+B_3$$

$$\begin{aligned}\text{avec}\quad B_1 &= 2h^2|\nabla\chi|^2\Pi_\beta+2h^2\chi(\Delta\chi)\Pi_\beta, &(4.3)\\ B_2 &= 4\chi h(\nabla\chi)\cdot h\nabla_x\Pi_\beta, &(4.4)\\ B_3 &= \chi^2[\Pi_\beta, I_a-I_a^0], &(4.5)\end{aligned}$$

$$\Pi\Big(\chi\Pi_\beta(L^{AD})^* - L^{AD}\Pi_\beta\chi\Big)\Pi = D+\Pi(B_1+B_2+B_3)\Pi$$

$$\text{pour} \quad D \;=\; \Pi\Big(\chi^2\Pi_\beta[-h^2\Delta_x,\Pi]^* - [-h^2\Delta_x,\Pi]\chi^2\Pi_\beta\Big)\Pi. \tag{4.6}$$

Pour estimer les termes faisant intervenir B_2 ou D, on aura besoin, pour $s > 1/2$, uniformément pour $\lambda \in J$, des estimations

$$\begin{aligned}
\Big\|\langle x\rangle^{-s} h\nabla_x R(\lambda \pm i0;h)\langle x\rangle^{-s}\Big\| &= O(h^{-1}), & (4.7)\\
\Big\|\langle x\rangle^{-s} h\nabla_x R^{AD}(\lambda \pm i0;h)\Pi\langle x\rangle^{-s}\Big\| &= O(h^{-1}), & (4.8)\\
\Big\|\langle x\rangle^{-s} h\nabla_x \Big\{R(\lambda \pm i0;h) - R^{AD}(\lambda \pm i0;h)\Pi\Big\}\langle x\rangle^{-s}\Big\| &= O(1). & (4.9)
\end{aligned}$$

D'après les arguments de [KMW] (cf. la preuve du Théorème 3.4 de [KMW]), les estimations (4.7) et (4.9) se déduisent de (4.8). Pour $z \in \mathbb{C}\setminus \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}
h\nabla_x\Pi R^{AD}(z)\Pi &= h\nabla_x\Pi R^{AD}(i)\Pi - (z-i)h\nabla_x\Pi R^{AD}(i)^2\Pi\\
&\quad -(z-i)^2 h\nabla_x\Pi R^{AD}(i)R^{AD}(z)R^{AD}(i)\Pi
\end{aligned}$$

et les opérateurs $R^{AD}(i)\Pi$ et $h\nabla_x\Pi R^{AD}(i)\Pi$ sont uniformément bornés (en h) sur

$$L^2_s\Big(\mathbb{R}^n_x; L^2(\mathbb{R}^{nN}_y)\Big) \equiv L^2\Big(\mathbb{R}^n_x; L^2(\mathbb{R}^{nN}_y); \langle x\rangle^{2s}dx\Big)$$

pour tout s (cf. l'annexe A dans [Jec-1]). D'après le Théorème 2.3, on peut faire tendre z vers $\lambda \in J$ avec $\pm\Im(z) > 0$ pour $s > 1/2$ et obtenir ainsi l'estimation (4.8). En posant

$$\begin{aligned}
Q^1_{\beta\alpha} &= \Im\Big\langle R(\lambda+i0)L_a e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta L_a e_\alpha\Big\rangle,\\
Q^{1,AD}_{\beta\alpha} &= \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD} e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta \Pi L^{AD} e_\alpha\Big\rangle,\\
Q^2_{\beta\alpha} &= \frac{1}{2i}\Big\langle (B_1+B_2+B_3)R(\lambda+i0)L_a e_\alpha\ ,\ R(\lambda+i0)L_a e_\alpha\Big\rangle,\\
Q^{2,AD}_{\beta\alpha} &= \frac{1}{2i}\Big\langle (B_1+B_2+B_3+D)R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD} e_\alpha\ ,\ R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD} e_\alpha\Big\rangle,
\end{aligned}$$

$$\sigma_{\beta\alpha}(\lambda,\omega;h) \;=\; \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)}(Q^1_{\beta\alpha}+Q^2_{\beta\alpha}) \quad \text{et} \quad \sigma^{AD}_{\beta\alpha}(\lambda,\omega;h) \;=\; \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda;h)}(Q^{1,AD}_{\beta\alpha}+Q^{2,AD}_{\beta\alpha}), \tag{4.10}$$

d'après (2.14) et (2.17). On étudie les différences

$$\begin{aligned}
Q^1_{\beta\alpha} - Q^{1,AD}_{\beta\alpha} &= \Im\Big\langle \Big(R(\lambda+i0) - R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big)L_a e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta L_a e_\alpha\Big\rangle\\
&\quad - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0)\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta\Pi L^{AD}e_\alpha\Big\rangle\\
&\quad - \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD}e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha\Big\rangle,
\end{aligned}$$

$$Q^2_{\beta\alpha} - Q^{2,AD}_{\beta\alpha} \;=\; \frac{1}{2i}\sum_{j=1}^{3}\Big\langle B_j\Big\{R(\lambda+i0) - R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}L_a e_\alpha\ ,\ R(\lambda+i0)L_a e_\alpha\Big\rangle \tag{4.11}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \frac{1}{2i}\sum_{j=1}^{3}\Big\langle B_j R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L_a e_\alpha\ ,\ \Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}L_a e_\alpha\Big\rangle \\
&- \frac{1}{2i}\sum_{j=1}^{3}\Big\langle B_j R^{AD}(\lambda+i0)\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha\ ,\ R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD} e_\alpha\Big\rangle \\
&- \frac{1}{2i}\sum_{j=1}^{3}\Big\langle B_j R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD} e_\alpha\ ,\ R^{AD}(\lambda+i0)\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha\Big\rangle \\
&- \Big\langle DR^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD}e_\alpha\ ,\ R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD}e_\alpha\Big\rangle . \qquad (4.12)
\end{aligned}
$$

Première étape: On écarte quelques termes négligeables.

Lemme 4.1 *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$,*

$$Q^1_{\beta\alpha} - Q^{1,AD}_{\beta\alpha} \ = \ \Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}\phi_1\ ,\ \chi^2\Pi_\beta\phi_1\Big\rangle + O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}).$$

Démonstration : On procède comme dans la preuve du Lemme 3.4 à partir de l'expression (4.12). Prenons $1/2 < s' < s < \rho - n/2$, s' et s assez proches de $1/2$. D'après (4.1), (4.2), (3.7), (3.9), (3.12), (3.14) et (3.15),

$$\|\langle x\rangle^{s'}\phi_1\| \ = \ O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)}),\ \ \|\langle x\rangle^{s'}\phi_2\| \ = \ O(h^{1+\gamma(1-n/2-s)+\min(\delta\gamma(\rho-n/2-s),\gamma,2)}), \quad (4.13)$$

$$
\begin{aligned}
\Big\|\langle x\rangle^{s'}\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha\Big\| \ &\leq \ \Big\|\langle x\rangle^{s'}h^2(\nabla_x\Pi)\cdot(\nabla\chi)e_\alpha\Big\| + O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)}) \qquad (4.14) \\
&= \ O(h^{2+\gamma(\rho+2-n/2-s)}) + O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)}) \ = \ O(h^{2+\gamma(2-n/2-s)}).
\end{aligned}
$$

On a donc, grâce à (2.8), $\Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0)\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta\Pi L^{AD}e_\alpha\Big\rangle$

$$= \ O(h^{-1+2+\gamma(2-n/2-s)+1+\gamma(1-n/2-s)}) \ = \ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(1-2s)})$$

avec $\gamma + \gamma(1-2s) > 0$ pour s assez proche de $1/2$. On a une estimation analogue pour

$$\Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L^{AD}e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta\Pi[-h^2\Delta_x,\Pi]\chi e_\alpha\Big\rangle.$$

Comme la différence des résolvantes est un $O(1)$ (cf. (2.10)),

$$\Im\Big\langle\Big\{R(\lambda{+}i0){-}R^{AD}(\lambda{+}i0)\Pi\Big\}L_a e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta L_a e_\alpha\Big\rangle \ = \ O(h^{2+2\gamma(1-n/2-s)}) \ = \ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s)})$$

ce qui est insuffisant. Mais si l'on retire le terme où ϕ_1 figure deux fois, les termes restant sont d'ordre, d'après (4.13),

$$1 + \gamma(1-n) + 1 + \gamma(1-2s) + \min(\delta\gamma(\rho - n/2 - s), \gamma, 2)$$

avec $\gamma(1-2s) + \min(\delta\gamma(\rho - n/2 - s), \gamma, 2) > 0$ pour s assez proche de $1/2$. □

Lemme 4.2 *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$,*

$$\begin{aligned} Q^2_{\beta\alpha} - Q^{2,AD}_{\beta\alpha} &= \frac{1}{2i}\Big\langle B_2\Big\{R(\lambda+i0) - R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}L_a e_\alpha \ , \ R(\lambda+i0)L_a e_\alpha\Big\rangle \\ &+ \frac{1}{2i} < B_2 R^{AD}(\lambda+i0)\Pi L_a e_\alpha \ , \ \Big(R(\lambda+i0) - R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big)L_a e_\alpha\Big\rangle \\ &+ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}). \end{aligned}$$

Démonstration : Tout d'abord, évaluons les B_j et D, donnés par (4.3), (4.4), (4.5) et (4.6). Pour $1/2 < s' < s < \rho - n/2$, s' et s assez proches de $1/2$,

$$\sup_x \|\langle x\rangle^{2s'} B_1(x)\|_y \ \leq \ C\sup_x\Big|h^2\langle x\rangle^{2s'-2}1\!\!\mathrm{I}_{\mathrm{supp}\nabla\chi}(x)\Big| \ = \ O(h^{2+\gamma(2-2s')}), \tag{4.15}$$

$$\sup_x\Big\|\langle x\rangle^{2s'} h\chi(x)|\nabla\chi(x)|\Pi_\beta\Big\|_y \ = \ O(h^{1+\gamma(1-2s')}), \tag{4.16}$$

$$\sup_x \|\langle x\rangle^{2s'} B_3(x)\|_y \ = \ O(h^{\gamma(\rho+1-2s')}) \ = \ O(h^{1+\gamma(2-2s')}), \tag{4.17}$$

où la norme $\|\cdot\|_y$ désigne celle des opérateurs bornés sur $L^2(I\!\!R^{nN}_y)$. Ecrivons

$$\begin{aligned} D \ = \ & 2h\Pi\chi^2\Pi_\beta(\nabla_x\Pi)\cdot h\nabla_x\Pi \ + \ h^2\Pi\chi^2\Pi_\beta(\Delta_x\Pi)\Pi \ + \ 2h^2\Pi(\nabla_x\Pi)\cdot(\nabla\chi^2)\Pi_\beta\Pi \\ & + \ 2h\chi^2(\nabla_x\Pi)\Pi_\beta\cdot h\nabla_x\Pi \ + \ h^2\Pi(\Delta_x\Pi)\chi^2\Pi_\beta\Pi. \end{aligned}$$

On a les estimations

$$\sup_x\Big\|\langle x\rangle^{2s'} h\chi(x)\Pi_\beta(\nabla_x\Pi)(x)\Big\|_y \ = \ O(h^{1+\gamma(\rho+1-2s')}) \ = \ O(h^{2+\gamma(2-2s')}), \tag{4.18}$$

$$\sup_x\Big\|\langle x\rangle^{2s'} h^2(\nabla_x\Pi)(x)\cdot(\nabla\chi)(x)\Pi_\beta\Big\|_y \ = \ O(h^{2+\gamma(\rho+2-2s')}) \ = \ O(h^{3+\gamma(3-2s')}), \tag{4.19}$$

$$\sup_x\Big\|\langle x\rangle^{2s'} h^2(\Delta_x\Pi)(x)\chi(x)\Pi_\beta\Big\|_y \ = \ O(h^{2+\gamma(\rho+2-2s')}) \ = \ O(h^{3+\gamma(3-2s')}). \tag{4.20}$$

D'après les estimations (4.15), (2.8), (2.9), (2.10) ainsi que les estimations (4.13), les termes de (4.11) contenant B_1 et une différence des résolvantes sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+2+\gamma+\gamma(2-2s-2s').$$

En utilisant en plus (4.14), les autres termes contenant B_1 sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+2+2\gamma+\gamma(2-2s-2s').$$

De même avec (4.17), ceux contenant B_3 et une différence des résolvantes sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(2-2s-2s').$$

Les autres termes contenant B_3, sont, d'après (4.14), d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+2\gamma+\gamma(2-2s-2s').$$

D'après (4.18), (4.19) et (4.20), le terme de (4.11) contenant D est lui d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(2-2s-2s').$$

Il reste à évaluer dans (4.11) les termes contenant B_2 mais pas de différence de résolvantes. D'après (4.16), (4.8) et (4.14), ils sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(2-2s-2s').$$

Et on a $\gamma+\gamma(2-2s-2s')>0$ pour s, s' assez proches de $1/2$. □

Lemme 4.3 *Il existe $\epsilon_0>0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda\in J$ et $\omega\in S^{n-1}$,*

$$\begin{aligned} Q^2_{\beta\alpha}-Q^{2,AD}_{\beta\alpha} &= \frac{1}{2i}\Big\langle B_2\Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}\phi_1\ ,\ R(\lambda+i0)\phi_1\Big\rangle \\ &+\frac{1}{2i}\Big\langle B_2R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\phi_1\ ,\ \Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}\phi_1\Big\rangle \\ &+O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}). \end{aligned}$$

Démonstration : Tout d'abord, estimons les termes qui restent à l'issue du Lemme 4.2. D'après (2.9), (2.10), (4.8) et (4.9), ces deux termes sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(2-2s-2s')$$

ce qui est insuffisant. Comme dans la preuve du Lemme 4.1, on s'aperçoit qu'en retirant les termes où ϕ_1 figure deux fois, les termes restant sont, d'après (4.13), d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(2-2s'-2s)+\min(\delta\gamma(\rho-n/2-s),\gamma,2)$$

avec $\gamma(2-2s'-2s)+\min(\delta\gamma(\rho-n/2-s),\gamma,2)>0$ pour s', s assez proches de $1/2$. □

Deuxième étape: Dans les Lemmes 4.1 et 4.3, on a montré que l'on pouvait remplacer $L^{AD}e_\alpha$ et L_ae_α par ϕ_1. Signalons que $\phi_1=(f_1+f_2)e_\alpha$, où les fonctions f_1 et f_2 sont définies par (3.10). En reprenant les notations de la troisième étape de la partie 3, on va voir que, là aussi, la partie des fonctions f_j qui est à support dans une région de petit paramètre d'impact joue un rôle négligeable. C'est l'objet des deux lemmes suivants.

Lemme 4.4 *Les fonctions f_{21} et f_{22} étant données par (3.16), il existe $\epsilon_0>0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda\in J$ et $\omega\in S^{n-1}$,*

$$\begin{aligned} Q^1_{\beta\alpha}-Q^{1,AD}_{\beta\alpha} &= \Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}(f_{21}+f_{22})e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle \\ &+O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}). \end{aligned}$$

Démonstration : Comme on l'a signalé dans la preuve du Lemme 4.1, le terme

$$\Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}(f_1+f_2)e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta(f_1+f_2)e_\alpha\Big\rangle$$

est d'ordre $1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s)$. D'après (3.17) et (3.18), les termes où figure au moins une fois un facteur f_{1k} sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-s'-s)+\delta\gamma(n-3/2)$$

avec $\gamma(1-s'-s)+\delta\gamma(n-3/2)>0$ pour s',s assez proches de $1/2$. $\square$

Lemme 4.5 *Il existe $\epsilon_0>0$ tel que, uniformément sur $J\times S^{n-1}$, $Q^2_{\beta\alpha}-Q^{2,AD}_{\beta\alpha}$ soit*

$$\begin{aligned} = \quad & \frac{1}{2i}\Big\langle B_2\Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}(f_{21}+f_{22})e_\alpha\ ,\ R(\lambda+i0)(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle \\ & +\frac{1}{2i}\Big\langle B_2R^{AD}(\lambda+i0)\Pi(f_{21}+f_{22})e_\alpha\ ,\ \Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle \\ & +\ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}). \end{aligned} \tag{4.21}$$

Démonstration : Pour $1/2<s^{'}<s<\rho-n/2$, s',s assez proches de $1/2$,

$$\Big\langle B_2\Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}(f_1+f_2)e_\alpha\ ,\ R(\lambda+i0)(f_1+f_2)e_\alpha\Big\rangle$$

est d'ordre $1+\gamma(1-n)+1+\gamma(2-2s'-2s)$. Grâce à (3.17) et (3.18), les termes où figure au moins une fois un facteur f_{1k}, pour $k\in\{1,2\}$, sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma(1-2s')+\gamma(1-s'-s)+\delta\gamma(n-3/2)$$

avec $\gamma(1-2s')+\gamma(1-s'-s)+\delta\gamma(n-3/2)>0$ pour s',s assez proches de $1/2$. $\square$

Troisième et dernière étape: On utilise maintenant les approximations établies dans la Proposition 3.8. On reprend donc les notations de la quatrième étape de la partie 3.

Lemme 4.6 *Il existe $\epsilon_0>0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda\in J$ et $\omega\in S^{n-1}$,*

$$Q^1_{\beta\alpha}-Q^{1,AD}_{\beta\alpha}=O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}).$$

Démonstration : D'après la Proposition 3.8,

$$\begin{aligned} Q^1_{\beta\alpha}-Q^{1,AD}_{\beta\alpha} \quad = \quad & -\ \Im\Big\langle ih^{-1}(\Pi-\Pi_0)(g_1+g_2)e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle \\ & +\ \Im\Big\langle\Big\{R(\lambda+i0)-R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}(r_1+r_2)e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle \\ & -\ \Im\Big\langle R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big(r_1^{AD}-r_1+r_2^{AD}-r_2\Big)e_\alpha\ ,\ \chi^2\Pi_\beta(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle \\ & +\ O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}) \end{aligned}$$

car $\chi_4=1$ sur le support des f_{2k}. Pour évaluer les deux derniers termes, il suffit de remarquer que les arguments de la preuve du Lemme 3.9 sont applicables ici puisque $\chi^2\Pi_\beta$ est uniformément borné. Ils sont donc d'ordre $1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0$ pour un certain

$\epsilon_0 > 0$. Pour estimer le premier terme, on peut reprendre les arguments de la preuve du Lemme 3.10 car, d'après la Proposition 3.1,

$$\left\langle \Big(\Pi(x) - \Pi_0\Big)\phi_\alpha, \chi^2\Pi_\beta\phi_\alpha \right\rangle_{L^2(\boldsymbol{R}_y^{nN})} \;=\; O(\langle x\rangle^{-\rho})$$

uniformément par rapport à h. Ce premier terme est donc d'ordre $1+\gamma(1-n)+1+\gamma$.□

Lemme 4.7 *Il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$,*

$$Q^2_{\beta\alpha} - Q^{2,AD}_{\beta\alpha} = O(h^{1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0}).$$

Démonstration : On utilise encore la Proposition 3.8 et les preuves des Lemmes 3.9 et 3.10. Pour les termes restant dans (4.21), on remplace chaque facteur contenant une différence de résolvantes par le terme correspondant donné par la Proposition 3.8. Dans l'expression ainsi obtenue, les termes contenant $(r_1^{AD} - r_1 + r_2^{AD} - r_2)$ sont

$$-\frac{1}{2i}\Big\langle B_2R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big(r_1^{AD} - r_1 + r_2^{AD} - r_2\Big)e_\alpha \;,\; R(\lambda+i0)(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle,$$
$$-\frac{1}{2i}\Big\langle B_2R^{AD}(\lambda+i0)\Pi(f_{21}+f_{22})e_\alpha \;,\; R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big(r_1^{AD} - r_1 + r_2^{AD} - r_2\Big)e_\alpha\Big\rangle.$$

D'après la preuve du Lemme 3.9, ils sont d'ordre

$$1+\gamma(1-n)+1+\gamma+\gamma(2-2s'-2s)-2\delta\gamma(\rho+1-n/2-s)$$

avec $\gamma+\gamma(2-2s'-2s)-2\delta\gamma(\rho+1-n/2-s) > 0$ pour s', s assez proches de $1/2$. Il reste

$$\frac{1}{2i}\Big\langle B_2\Big\{R(\lambda+i0) - R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}(r_1+r_2)e_\alpha \;,\; R(\lambda+i0)(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle \quad (4.22)$$
$$+\;\frac{1}{2i}\Big\langle B_2R^{AD}(\lambda+i0)\Pi(f_{21}+f_{22})e_\alpha \;,\; \Big\{R(\lambda+i0) - R^{AD}(\lambda+i0)\Pi\Big\}(r_1+r_2)e_\alpha\Big\rangle$$

$$+\;\frac{1}{2i}\Big\langle B_2ih^{-1}\chi_4(g_1+g_2)(\Pi_0-\Pi)e_\alpha \;,\; R(\lambda+i0)(f_{21}+f_{22})e_\alpha\Big\rangle \quad (4.23)$$
$$+\;\frac{1}{2i}\Big\langle B_2R^{AD}(\lambda+i0)\Pi(f_{21}+f_{22})e_\alpha \;,\; ih^{-1}\chi_4(g_1+g_2)(\Pi_0-\Pi)e_\alpha\Big\rangle$$

à évaluer. Comme B_2 est localisé dans $C_{\gamma\eta}$, on peut reprendre la preuve du Lemme 3.9 et les deux termes de (4.22) sont donc d'ordre supérieur à

$$1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0$$

pour un certain $\epsilon_0 > 0$. Pour estimer les deux termes de (4.23), on montre d'abord que, pour $1/2 < s' < s < \rho - n/2$, pour $C = B_2$ donné par (4.4) et $C = B_2^*$,

$$\Big\|\langle x\rangle^{s'}\; C\; ih^{-1}\chi_4(g_1+g_2)(\Pi_0-\Pi)e_\alpha\Big\| \;=\; O(h^{1+\gamma(\rho+1-n/2-s)}). \quad (4.24)$$

D'après les propriétés (3.4), (3.24) et (3.19) et la Proposition 3.1, on voit que le plus "mauvais" terme dans (4.24) est

$$ih^{-1}\chi_4(g_1+g_2)(\Pi_0-\Pi)\Pi_\beta\, 4\chi h(\nabla\chi)\cdot h(\nabla_x e_\alpha) \;=\; -\chi_4(g_1+g_2)(\Pi_0-\Pi)\Pi_\beta\, 4\chi h(\nabla\chi)\cdot n_\alpha(\lambda)\omega e_\alpha$$

car la dérivation "consomme" un h. Par les mêmes propriétés et le fait que $(\nabla\chi)$ est à support dans $C_{\gamma\eta}$, on en déduit (4.24). Là encore, on peut reprendre la preuve du Lemme 3.9 et les termes de (4.23) sont d'ordre $1+\gamma(1-n)+1+\epsilon_0$ avec $\epsilon_0 > 0$. □

5 Termes dominants de σ_α, prépondérance de la diffusion élastique.

Dans cette partie, on exibe dans σ_α les différents termes (1.8) en utilisant les arguments de [RW] (voir aussi [RT]). Pour $I_{\rm eff}$, on utilise l'approximation adiabatique (1.6). D'autre part, on détermine quelle section efficace totale produit ces termes dominants, à savoir $\sigma_{\alpha\alpha}$, la section efficace totale décrivant la diffusion élastique (cf. [I2]). La question de l'optimalité des résultats du Théorème 1.2 est ensuite abordée.

Théorème 5.1 *Avec les hypothèses et les notations du Théorème 1.2, il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$, on ait (1.8) pour*

$$I(x) \;=\; I_a^0(x) \;\equiv\; I_a(x;h)|_{y=0} \text{ et } I(x) \;=\; \hat{I}_a(x) \;\equiv\; \langle I_a(x;0)\phi_\alpha(0), \phi_\alpha(0)\rangle_{L^2(\mathbb{R}_y^{nN})}.$$

Démonstration : D'après les relations (3.30) et (3.31) et le Lemme 3.10,

$$\sigma_\alpha(\lambda,\omega;h) \;=\; \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda)} \sum_{1\leq j,k\leq 2} \Im\Big\langle ih^{-1}g_j \;,\; f_{2k}\Big\rangle \;+\; O(h^{\gamma(1-n)+\epsilon_0}). \tag{5.1}$$

Puisque le projecteur $\Pi(x)$ est absent dans (5.1), il suffit de suivre les arguments de [RW] pour obtenir (1.8) avec $I(x) = I_a^0(x)$.

Pour l'estimation concernant $\hat{I}_a$, on effectue un développement de Taylor en h qui donne

$$I_a(x;h)\Pi_0(h) \;=\; I_a(x;0)\Pi_0(h) \;+\; O(h^2\langle x\rangle^{-\rho-1}) \tag{5.2}$$

(voir (3.11)) et, en développant par rapport à y cette fois, on a

$$\begin{aligned} I_a(x;0) - \hat{I}_a(x) \;&=\; I_a^0(x) - I_a^0(x)\|\phi_\alpha(0)\|^2 \\ &\quad + I_a^1(x;0) - \langle I_a^1(x;0)\phi_\alpha(0), \phi_\alpha(0)\rangle, \end{aligned} \tag{5.3}$$

pour un certain potentiel $I_a^1(x;0)$ vérifiant

$$\|I_a^1(x;0)\Pi_0(h)\| \;=\; O(\langle x\rangle^{-\rho-1}).$$

Le premier terme dans (5.3) est nul puisque la fonction propre $\phi_\alpha(0)$ est normalisée. On peut donc reprendre la preuve du Théorème 2.4 et les arguments de [RW], en remplaçant dans la deuxième étape de la partie 3 I_a^0 par $\hat{I}_a$, puisque ce dernier possède les propriétés de décroissance de I_a^0. □

Théorème 5.2 *Sous les hypothèses du Théorème 1.2, on suppose que la valeur propre $E_\alpha(h)$ tend vers une valeur propre simple E_p pour $p \equiv j_\alpha \in \{1,\cdots,r\}$. Uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$, il existe $\epsilon_0 > 0$, tel que (1.8) soit valable pour $I_{\rm eff}(x) = \lambda_p(x;0) - E_p$. En particulier, ceci est valable pour $p = 1$.*

Démonstration : Grâce à l'approximation adiabatique (1.6), il suffit de prouver que le terme en question est dominant pour la section efficace totale σ_α^{AD}. D'après (5.2),

$$\begin{aligned}\Pi(x;h)I_a(x;h)\Pi_{p0}(h) &= \Pi(x;h)I_a(x;0)\Pi_{p0}(h) \; + \; O(h^2\langle x\rangle^{-\rho-1}) \\ &= \Pi(x;h)\Pi(x;0)I_a(x;0)\Pi_{p0}(0)\Pi_{p0}(h) \; + \; O(h^2\langle x\rangle^{-\rho}),\end{aligned}$$

grâce à la Proposition 3.1. En écrivant $I_a(x;0) = P_e(x;0) - P^a(0)$ et en utilisant la simplicité de E_p, on obtient

$$\Pi(x;h)I_a(x;h)\Pi_{p0}(h) \; = \; I_{\text{eff}}(x)\Pi(x;h)\Pi_{p0}(h) \; + \; O(h^2\langle x\rangle^{-\rho})$$

et on peut reprendre les preuves des Théorèmes 2.4 et 5.1 en remplaçant I_a^0 par I_{eff}.□

Par définition (cf. (2.3)), σ_α est la somme de contributions de tous les canaux de sorties possibles. Lesquels produisent la contribution principale en $h^{\gamma(1-n)}$? D'après la Remarque 2.7, ils sont parmi les canaux dits adiabatiques (cf. (2.4)). L'objet du Théorème 5.3 suivant est de montrer que, parmi ces canaux adiabatiques, le canal de sortie α est prépondérant. Dans le cas de l'asymptotique relative à la constante de Planck $\hbar$, où le potentiel inter-amas I_a ne dépend pas de $\hbar$, ce résultat est connu (cf. [I2]). On reprend d'ailleurs la technique utilisée dans [I2].

Théorème 5.3 *Sous les hypothèses du Théorème 1.2, il existe $\epsilon_0 > 0$ tel que, uniformément par rapport à $\lambda \in J$ et $\omega \in S^{n-1}$, on ait (1.5).*

Démonstration : D'après (5.1), il suffit donc de prouver l'estimation suivante

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\lambda,\omega;h) \; = \; \frac{C_a(h)h^{-1}}{n_\alpha(\lambda)} \sum_{1\leq j,k\leq 2} \Re\Big\langle h^{-1}g_j e_\alpha \; , \; f_{2k}e_\alpha\Big\rangle \; + \; O(h^{\gamma(1-n)+\epsilon_0}), \tag{5.4}$$

où $\Re$ désigne la partie réelle. Grâce à l'absence du projecteur $\Pi(x)$, on peut reprendre directement les arguments de [I2]. □

Pour discuter de l'**optimalité** des résultats du Théorème 1.2, considérons un exemple concret, proche du cas physique, et essayons d'estimer l'ordre du terme fourni par (1.8) lorsque $I = I_a^0$. Remplaçons momentanément le potentiel I_a^0 par la fonction

$$V_\epsilon(x) = |x|^{-\rho}\Phi(x/|x|)\Big(1-\chi(x/\epsilon)\Big)$$

pour $\epsilon > 0$, pour $\Phi \in C^\infty(S^{n-1}; I\!R)$ et pour une fonction paire $\chi \in C_0^\infty(I\!R^n; I\!R)$ valant 1 près de 0. On s'inspire de [Y]. Après un passage en coordonées sphériques sur H_ω,

$$\int_{H_\omega} \sin^2\left(\frac{1}{4n_\alpha(\lambda)h}\int_{-\infty}^{+\infty} V_\epsilon(x_\omega+u\omega)du\right)dx_\omega \tag{5.5}$$

$$= \; a\int_{S^{n-2}}\int_0^{+\infty} \sin^2\left(\frac{c}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} V_\epsilon(r\phi+u\omega)du\right) r^{n-2}dr\,d\phi,$$

où a, c sont des constantes. En remplaçant V_ϵ par $V_0(x) = |x|^{-\rho}\Phi(x/|x|)$, ce terme a encore un sens et vaut

$$a' h^{\gamma(1-n)} \frac{\pi}{(n-1)\Gamma(\gamma(n-1))\sin(\pi\gamma(n-1)/2)} \int_{S^{n-2}} |\Omega(\omega,\phi)|^{\gamma(n-1)} d\phi, \qquad (5.6)$$

où a' est une nouvelle constante, Γ désigne la fonction "gamma" et où Ω est donnée par

$$\Omega(\omega,\phi) \ = \ \int_0^\pi \Phi(\omega\cos\theta + \phi\sin\theta)\sin^{\rho-2}\theta d\theta.$$

Posons

$$\psi_\epsilon \ \equiv \ \frac{c}{2h}\int_{-\infty}^{+\infty} V_\epsilon(r\phi + u\omega)du$$

et définissons de même ψ_0 avec V_0. La différence (5.5) moins (5.6) est majorée par

$$a\int_{S^{n-2}}\int_{r\leq d\epsilon} 2\Big|\sin(\psi_0 - \psi_\epsilon)\cos(\psi_0+\psi_\epsilon)\Big(\sin(2\psi_0)+\sin(2\psi_\epsilon)\Big)\Big| r^{n-2}dr\, d\phi,$$

car $\psi_\epsilon - \psi_0$ est nulle dès que r est grand devant ϵ. Par conséquent, cette différence est contrôlée par une constante multipliée par ϵ^{n-1}, qui tend vers 0 lorsque ϵ tend vers 0. En conclusion, le terme considéré (5.5) est supérieur à la moitié du terme (5.6), pourvu que ϵ soit assez petit. On voit que ce terme (5.6) est réellement d'ordre $h^{\gamma(1-n)}$ pour $\Phi = 1$ par exemple.

Revenons à I_a^0. Pour V_ϵ avec $\Phi = 1$, on considère les interactions

$$\begin{cases} V_{ij} &= e^2 V_\epsilon, & \text{si} \quad i \in A_1', j \in A_2', \\ V_{ij} &= -eZ_1 V_\epsilon, & \text{si} \quad i = 1, j \in A_2', \\ V_{ij} &= -eZ_2 V_\epsilon, & \text{si} \quad i \in A_1', j = 2, \\ V_{12} &= Z_1 Z_2 V_\epsilon, & \end{cases}$$

où les constantes e, Z_1, Z_2 sont strictement positives. D'après (2.6) et le fait que $I_a^0(x) = I_a(x;h)|_{y=0}$, on obtient

$$I_a^0(x) \ = \ \Big(e^2|A_1'|\cdot|A_2'| + Z_1Z_2 - e|A_2'|Z_1 - e|A_1'|Z_2\Big)V_\epsilon(x) \ = \ (N_1 - Z_1)(N_2 - Z_2)V_\epsilon(x)$$

avec $N_j = e|A_j'|$, $1 \leq j \leq 2$. Si l'on considère deux "vrais" ions, i.e. $N_j \neq Z_j$ pour $1 \leq j \leq 2$, alors le terme fourni par (1.8) pour $I = I_a^0$ est réellement d'ordre $h^{\gamma(1-n)}$.

Références

[A] S.Agmon : *Lectures on Exponential Decay of Solutions of Second-Order Elliptic Equations.* Princeton University Press, 1982.

[AJS] W.O.Amrein, J.M.Jauch, K.B.Sinha : *Scattering Theory in Quantum Mechanics. Physical Principles and Mathematical Methods.* Lecture notes and supplements in Physics, David Pines, 1977.

[BO] M.Born, R.Oppenheimer : *Zur Quantentheorie der Molekeln.* Annalen der Physik, 84, 457, 1927.

[CT] J.M.Combes, A.Tip : *Properties of the scattering amplitude for electron-atom collisions.* Ann. I.H.P., vol. 40, n^o 2, 1984, p. 117-139.

[ES] V.Enss, B.Simon : *Finite Total Cross-Section in Nonrelativistic Quantum Mechanics.* Commun. Math. Phys. 76, 177-209 (1980).

[I1] H.T.Ito : *High-energy behavior of the total scattering cross sections for 3-body quantum systems.* Publ. Res. Inst. Math. Sci. 29, No. 5, 803-832 (1993).

[I2] H.T.Ito : *The semiclassical asymptotics of the total cross-sections for elastic scattering for N-body systems.* J.Math. Kyoto Univ. 33, No. 4, 1143-1164 (1993).

[Jec-1] Th.Jecko : *Sections efficaces totales d'une molécule diatomique dans l'approximation de Born-Oppenheimer.* Thèse de doctorat, université de Nantes, 1996.

[Jec-2] Th.Jecko : *Estimations de la résolvante pour une molécule diatomique dans l'approximation de Born-Oppenheimer.* Comm. Math. Phys. 195, 585-612 (1998).

[K] T.Kato : *Perturbation Theory for Linear Operators.* Springer, Berlin, 1976.

[Kar] A.Kargol : *The infinite limit for the time-dependent Born-Oppenheimer approximation.* Commun. Math. Phys. 166, 129-148, (1994).

[KMSW] M.Klein, A.Martinez, R.Seiler, X.P.Wang : *On the Born-Oppenheimer Expansion for Polyatomic Molecules.* Commun. Math. Phys. 143, 606-639, 1992.

[KMW] M.Klein, A.Martinez, X.P.Wang : *On the Born-Oppenheimer Approximation of Wave Operators in Molecular Scattering Theory.* Commun. Math. Phys. 152, 73-95, 1993.

[RT] D.Robert, H.Tamura : *Semiclassical estimates for resolvents and asymptotics for total cross-section.* Ann. IHP 46, 415-442, 1987.

[RW] D.Robert, X.P.Wang : *Pointwise Semiclassical Asymptotics for Total Cross Sections in N-body Problems.* Dans "Spectral and Scattering Theory" p181-196, Lectures Notes in Pure and Applied Mathematic, vol. 161, Marcel Dekker, 1994.

[SS] I.M.Sigal, A.Soffer : *The N-particle scattering problem : asymptotic completeness for short range systems.* Ann. of Math. 126 (1987), 35-108.

[W] X.P.Wang : *Total Cross Sections in N-body Problems : Finitness and High Energy Asymptotics.* Comm.Math.Phys. 156, 333-354, 1993.

[Y] D.R.Yafaev : *The Eikonal approximation and the asymptotics of the total scattering cross-section for Schrödinger equation.* Ann. IHP 44, n^o 4, 1986, 397-425.