

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI
Corso di Laurea in Matematica

Interazione fra buche sovrapposte: studio delle risonanze

Tesi di Laurea in Fisica Matematica Quantistica

Relatore:
Ch.mo prof. A. G. Martinez

Presentata da
Jacopo Lanzoni

Parole chiave: Approssimazione di Born-Oppenheimer; risonanze quantistiche; analisi semiclassica; interazioni microlocali; molecole pluriatomiche.

I sessione
Anno Accademico 2009-2010

*Ai miei genitori
Iader e Lorian*

Indice

1	Introduzione: l'approssimazione di Born-Oppenheimer	5
2	Il caso diatomico	9
3	Il modello pluridimensionale	13
4	La riduzione a un problema autoaggiunto	17
5	Stima dell'interazione	23

Capitolo 1

Introduzione: l'approssimazione di Born-Oppenheimer

In fisica quantistica, l'evoluzione temporale di una molecola è descritta dalla soluzione ϕ al problema ai valori iniziali per l'equazione di Schrödinger

$$\begin{cases} i\partial_t\phi = H\phi \\ \phi|_{t=0} = \phi_0 \end{cases} \quad (1.1)$$

dove ϕ_0 è lo stato iniziale della molecola e H l'hamiltoniana molecolare, che contiene le interazioni tra le particelle che costituiscono la molecola - elettroni e nuclei - e i potenziali degli eventuali campi elettrici in cui la molecola è immersa.

Nel caso di una molecola libera, cioè non immersa in alcun campo, un primo approccio per studiare il sistema (1.1) consiste nel trascurare il moto del centro di massa e nel considerare solo gli stati iniziali legati, cioè gli stati iniziali che sono autofunzioni dell'hamiltoniana. Più precisamente, si può dividere l'hamiltoniana in

$$H = H_{CM} + H_{Rel},$$

con i due operatori H_{CM} , che è l'energia cinetica del centro di massa, e H_{Rel} , che è il moto relativo di elettroni e nuclei, che commutano tra loro. Di conseguenza, l'evoluzione quantistica si fattorizza in

$$e^{-itH} = e^{-itH_{CM}}e^{-itH_{Rel}},$$

dove l'evoluzione libera $e^{-itH_{CM}}$ del centro di massa può essere calcolata esplicitamente dal momento che H_{CM} ha coefficienti costanti, mentre il moto relativo $e^{-itH_{Rel}}$ contiene ancora le interazioni che rendono difficile la risoluzione del problema. Prendendo poi ϕ_0 della forma

$$\phi_0 = \alpha_0 \otimes \psi_j, \quad (1.2)$$

con α_0 dipendente solo dalla posizione del centro di massa e ψ_j un'autofunzione di H_{Rel} relativa all'autovalore E_j , la soluzione di (1.1) è data da

$$\phi(t) = e^{-itE_j}(e^{-itH_{CM}}\alpha_0) \otimes \psi_j.$$

In questo caso il vero problema è perciò conoscere sufficientemente bene gli autovalori di H_{Rel} per essere in grado di costruire uno stato iniziale della forma (1.2).

Nel 1927 Max Born e Robert Oppenheimer (cfr. [2]) proposero un metodo per costruire una tale approssimazione degli autovalori e delle autofunzioni di H_{Rel} . Il metodo è basato sul fatto che i nuclei sono molto più pesanti degli elettroni, così il loro moto è più lento e permette agli elettroni di adattarsi quasi istantaneamente ad esso. Di conseguenza, il moto degli elettroni non è realmente percepito dai nuclei, eccetto che per un campo elettrico circostante creato dalla loro energia potenziale totale, che diventa funzione delle posizioni dei nuclei. In questo modo, l'evoluzione delle molecole si riduce a quella dei nuclei immersi in un potenziale elettrico effettivo creato dagli elettroni. Una tale riduzione permette in un secondo momento di utilizzare gli strumenti semiclassici al fine di trovare gli autoelementi dell'hamiltoniana effettiva finale.

Siano M la massa del nucleo ed m quella dell'elettrone: poniamo per semplicità $m = 1$ e definiamo il parametro

$$h := \sqrt{\frac{1}{M}}.$$

Data una molecola formata da n atomi e immersa in un campo elettromagnetico esterno, l'operatore hamiltoniano è

$$H = -\frac{1}{2M}\Delta_{\mathbf{x}} + Q(\mathbf{x}), \quad \text{su } \mathcal{H} = (L^2(\mathbb{R}^3))^{\otimes n}$$

dove $(\Delta_{\mathbf{x}}, (H^2(\mathbb{R}^3))^{\otimes n})$ è autoaggiunto e rappresenta l'energia cinetica dei nuclei di massa M , mentre l'operatore $Q(\mathbf{x})$ rappresenta l'hamiltoniana elettronica con le varie interazione e l'eventuale campo esterno. Assumiamo che $Q(\mathbf{x})$, che attribuisce alla posizione \mathbf{x} dei nuclei la posizione \mathbf{y} degli elettroni, ammetta un autovalore isolato $\lambda(\mathbf{x})$ di autofunzione $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$,

$$Q(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \lambda(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad \|\psi(\mathbf{x}, \cdot)\| = 1,$$

e cerchiamo ϕ della forma

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

dove $f(\mathbf{x})$ è uno stato coerente nella variabile \mathbf{x} . Così, l'equazione agli autovalori $H\phi = E\phi$ si sviluppa come

$$-\frac{1}{2M}\Delta_{\mathbf{x}}[f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})] + Q(\mathbf{x})f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = Ef(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2M}[\Delta_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \nabla_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x})\nabla_{\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + f(\mathbf{x})\Delta_{\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})] + f(\mathbf{x})Q(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = Ef(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \\
& -\frac{1}{2}h^2[\Delta_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \nabla_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x})\nabla_{\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + f(\mathbf{x})\Delta_{\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})] + f(\mathbf{x})\lambda(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = Ef(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \\
& \left[-\frac{1}{2}h^2\Delta_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x}) + \lambda(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) - Ef(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - h^2 [\nabla_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x})\nabla_{\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + f(\mathbf{x})\Delta_{\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})] = 0.
\end{aligned}$$

La teoria di Born-Oppenheimer consiste a questo punto nel trascurare il termine $\nabla f \nabla \psi + f \Delta \psi$, e nell'approssimare l'intera equazione tramite

$$\left(-\frac{1}{2}h^2\Delta_{\mathbf{x}} - \lambda(\mathbf{x}) - E \right) f(\mathbf{x}) = 0.$$

Per comprendere meglio la natura di tale approssimazione occorre parlare di 'ordine'. Un operatore differenziale semiclassico $P(\mathbf{x}, D_{\mathbf{x}}; h)$ di grado m può essere scritto nella forma $P(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}}; h)$ come

$$P(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}}; h) = \sum_{|\alpha| \leq m} a_{\alpha}(\mathbf{x})(hD_{\mathbf{x}})^{\alpha} + \sum_{k=1}^K h^k \sum_{|\alpha| \leq m} a_{k,\alpha}(\mathbf{x})(hD_{\mathbf{x}})^{\alpha}, \quad (1.3)$$

e si dice che ha ordine K . Diciamo quindi che un operatore differenziale semiclassico $P(\mathbf{x}, D_{\mathbf{x}}; h)$ di grado m ha ordine zero se possiamo scriverlo nella forma $P(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}}; h)$ come

$$P(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}}; h) = \sum_{|\alpha| \leq m} a_{\alpha}(\mathbf{x})(hD_{\mathbf{x}})^{\alpha}.$$

Poichè in fisica quantistica tali operatori sono tipicamente applicati a funzioni della forma $f(\mathbf{x}; h) = e^{i\phi(\mathbf{x})/h}$ (approssimazione WKB, cfr. [8]), abbiamo che

$$hD_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x}; h) = h\frac{1}{i}\partial_{\mathbf{x}}e^{i\phi(\mathbf{x})/h} = h\frac{1}{i}e^{i\phi(\mathbf{x})/h}\frac{i}{h}\partial_{\mathbf{x}}\phi(\mathbf{x}) = \partial_{\mathbf{x}}\phi(\mathbf{x})f(\mathbf{x}; h),$$

cioè l'operatore $hD_{\mathbf{x}}$ si riduce alla moltiplicazione per il gradiente della fase. É chiaro ora come, per valori di h molto piccoli, il secondo termine dell'espressione (1.3) sia 'trascurabile' rispetto al primo.

Scrivendo

$$\phi_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \sum_{k \geq 1} h^k \phi_{0,k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \mathcal{O}(h),$$

per $\phi_{0,k}$ scelti opportunamente, allora possiamo dedurre

$$\phi_t(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f_t(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \sum_{k \geq 1} h_{t,k}^{\phi}(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

dove f_t e $\phi_{t,k}$ possono essere calcolati esplicitamente tramite il flusso classico dell'hamiltoniana effettiva $H_{\text{eff}}(\mathbf{x}, \xi) := K_n(\xi) + \lambda(\mathbf{x})$ (si veda a riguardo la definizione 3.1).

Definiti, più in generale, i livelli elettronici $\lambda_1(\mathbf{x}) \leq \lambda_2(\mathbf{x}) \leq \dots \leq \lambda_n(\mathbf{x})$ come gli autovalori di $Q(\mathbf{x})$, l'approssimazione di Born-Oppenheimer consiste nel sostituire l'operatore $Q(\mathbf{x})$ con un operatore matriciale del tipo

$$Q'(\mathbf{x}, M) := \begin{pmatrix} \lambda_1(\mathbf{x}) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2(\mathbf{x}) & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{M}} R \left(\mathbf{x}, \frac{1}{\sqrt{M}} D_{\mathbf{x}} \right),$$

dove R è una matrice quadrata di dimensione n di operatori pseudodifferenziali. Attraverso l'approssimazione di Born-Oppenheimer ci riduciamo così a studiare l'equazione di Schrödinger 'approssimata' $ih\partial_t\phi = P(h)\phi$, con

$$P(h) = -\frac{h^2}{2}\Delta_{\mathbf{x}}I_n + Q'(\mathbf{x}) + hR(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}}),$$

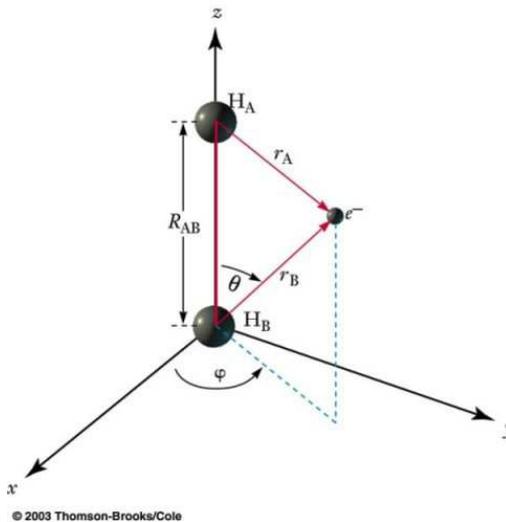
dove I_n è la matrice identità di dimensione n .

Nella tesi ci occuperemo di questo operatore per il caso delle molecole diatomiche (dunque con $n = 2$), con particolare attenzione nei confronti delle risonanze generate da potenziali a buche sovrapposte.

Capitolo 2

Il caso diatomico

Il capitolo è dedicato all'esposizione dei risultati noti nel caso di una molecola diatomica ($n=2$), seguendo il lavoro [4] di Grecchi, Kovarik, Martinez, Sacchetti e Sordani. In breve, se $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^3$ sono le coordinate dei due atomi che costituiscono la molecola, fissiamo la posizione di uno dei due atomi come l'origine del sistema cartesiano e indichiamo le coordinate del secondo con $\mathbf{R} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$, $R := |\mathbf{R}|$, e con \mathbf{r} la posizione dell'elettrone. In questo modo, per potenziali invarianti per rotazione, otteniamo un operatore P altrettanto invariante. Passando in coordinate polari e fissando il valore del momento angolare, ci si riduce così a un problema unidimensionale.



Consideriamo l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo con operatore hamiltoniano della forma

$$H = -h^2 \Delta_{\mathbf{R}} + \frac{1}{R} + H_e \quad (2.1)$$

dove $h \ll 1$ e H_e è l'hamiltoniana elettronica, formalmente definita su $L^2(\mathbb{R}_{\mathbf{r}}^3)$ come

$$H_e := H_e(\mathbf{R}) = -\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{1}{|\mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{R}|} - \frac{1}{|\mathbf{r} + \frac{1}{2}\mathbf{R}|} + V, \quad (2.2)$$

dove V è il potenziale esterno. L'operatore (2.1) agisce sullo spazio di Hilbert

$$\mathcal{K} = L^2(\mathbb{R}_{\mathbf{R}}^3; L^2(\mathbb{R}_{\mathbf{r}}^3)).$$

L'analisi di un tale problema a tre corpi è difficile, e occorre introdurre alcune ipotesi. Assumiamo innanzitutto che il potenziale V dipenda solo dalla componente del vettore \mathbf{r} lungo la direzione \mathbf{R} . In questo modo, è possibile introdurre una rotazione che commuta con H e si ottiene quindi che lo spettro dell'operatore hamiltoniano elettronico $H_e(\mathbf{R})$ dipende solo da $R := |\mathbf{R}|$.

Ora, indicati con $\mathbf{L}_{\mathbf{R}}$ ed $\mathbf{L}_{\mathbf{r}}$ i momenti angolari rispetto a \mathbf{R} e rispetto a \mathbf{r} , vediamo che $[H, \mathbf{L}_{\mathbf{R}} + \mathbf{L}_{\mathbf{r}}] = 0$. Nel seguito saremo particolarmente interessati agli autovalori e alle risonanze della restrizione di H al sottospazio invariante $\text{Ker}(\mathbf{L}_{\mathbf{R}} + \mathbf{L}_{\mathbf{r}})$. Questo corrisponde in qualche modo a fissare a 0 l'energia rotazionale della molecola. Dopo la riduzione di Born-Oppenheimer a una hamiltoniana effettiva $P = P(\mathbf{R}, hD_{\mathbf{R}})$, questo equivale allo studio della restrizione di P a $\text{Ker}(\mathbf{L}_{\mathbf{R}})$.

Per ogni fissato $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^n$, indichiamo con $\text{Sp}(H_e(\mathbf{R}))$ lo spettro dell'operatore hamiltoniano elettronico $H_e(\mathbf{R})$ definito sullo spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R}_{\mathbf{r}}^3)$, che dipende solo da R . Assumiamo che tale spettro contenga almeno due autovalori, di cui i primi due $\lambda_1(R)$ e $\lambda_2(R)$

- siano non-degeneri;
- si estendano in modo olomorfo in un sottile intorno complesso Γ_{δ} della retta reale;
- siano tali che

$$\lim_{\Gamma_{\delta} \ni R \rightarrow \infty} \lambda_1(R) =: \lambda_1^{\infty} < \lambda_2^{\infty} := \lim_{\Gamma_{\delta} \ni R \rightarrow \infty} \lambda_2(R).$$

Inoltre, supponiamo che i primi due autovalori e il resto dello spettro siano ben distinti.

Indichiamo il potenziale effettivo associato al j -esimo autovalore con

$$V_j(R) = \frac{1}{R} + \lambda_j(R).$$

Supponiamo anche che il potenziale effettivo sia tale che

- è una funzione analitica rispetto a R ;
- quando $R \rightarrow 0+$, $V_j(R) \rightarrow +\infty$;

- il potenziale effettivo V_1 ha la forma di un pozzo, con minimo non-degenere m_1 in un punto R_1^m e sulla barriera massimo non-degenere M_1 in un punto R_1^M . Inoltre, V_1 non ammette altri punti critici nel dominio $V_1^{-1}([m_1, M_1])$. Anche il potenziale effettivo V_2 ha la forma di un pozzo, con minimo locale m_2 in un punto R_2^m .

In coordinate polari l'hamiltoniana (2.1) assume la forma

$$H = -h^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R} \right] - h^2 \frac{1}{R^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] + \frac{1}{R} + H_e(\mathbf{R}) \quad (2.3)$$

L'operatore $-h^2 R^{-2} [(\sin \theta)^{-1} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + (\sin \theta)^{-2} \partial_\theta^2]$ ha autovalori $h^2 R^{-2} l(l+1)$ per ogni $l \in \mathbb{N}$. Esiste allora una rotazione che dà all'operatore H la forma

$$H = -h^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R} \right] + h^2 \frac{l(l+1)}{R^2} + \frac{1}{R} + H_e(\mathbf{R}) \quad \text{su} \quad L^2(\mathbb{R}_+, R^2 dR; L^2(\mathbb{R}_\mathbf{r}^3)).$$

Infine, prendendo $l = 0$, considerando cioè la restrizione di H a $\text{Ker}(\mathbf{L}_\mathbf{R})$, e cambiando la variabile $\psi(R, \mathbf{r}) \rightarrow R\psi(R, \mathbf{r})$, l'hamiltoniana H prende la forma

$$H_0 = -h^2 \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} + H_e(\mathbf{R}) \quad \text{su} \quad L^2(\mathbb{R}_+, dR; L^2(\mathbb{R}_\mathbf{r}^3)),$$

con condizione al bordo di Dirichlet in $R = 0$.

Con l'approssimazione di Born-Oppenheimer possiamo ricondurre l'hamiltoniana precedente all'operatore ridotto

$$P_j = -h^2 \frac{d^2}{dR^2} + V_j(R) \quad \text{su} \quad L^2(\mathbb{R}_+, dR), \quad (2.4)$$

per $j = 1, 2$ e con condizione al bordo di Dirichlet in $R = 0$. Allora segue che per $0 < h \ll 1$ e per un campo esterno piccolo, lo spettro discreto di P_j nell'intervallo $[m_j, \mathcal{E}_j^\infty)$ è non-vuoto. Nel caso di minimi non-degeneri sappiamo che la distanza tra gli autovalori è di ordine h con $h \rightarrow 0$.

Definiamo formalmente l'operatore differenziale

$$P = -h^2 \Delta_R \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_1(R) & 0 \\ 0 & V_2(R) \end{pmatrix} + h^2 \begin{pmatrix} 0 & a(R) \\ a_0(R) & 0 \end{pmatrix} D_R$$

con $a_0 \in C_b^\infty$.

Per tale operatore si conoscono alcuni risultati importanti, ma prima di enunciarli occorre dare la definizione di distorsione analitica, di una funzione e di un operatore.

Definizione 2.1. Siano $\mu \ll 1$ ed $s \in C^\infty(\mathbb{R})$, $0 \leq s \leq 1$ con $s(x) = 0$ su un intorno compatto dell'origine, $s(x) = 1$ per $|x| \gg 1$. Poniamo

$$I_\mu : \mathbb{R}^n \ni \mathbf{R} \longrightarrow (1 + \mu s(R)) \mathbf{R} \in \mathbb{R}^n, \quad J_\mu : \mathbb{R}^6 \ni (\mathbf{R}, \mathbf{r}) \longrightarrow \left[1 + \mu s \left(\left\langle \frac{\mathbf{R}}{R}, \mathbf{r} \right\rangle \right) \right] \mathbf{r} \in \mathbb{R}^n,$$

e definiamo la distorsione analitica della funzione test ϕ con la formula

$$S_\mu \phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) := \sqrt{|J(\mathbf{R}, \mathbf{r})|} \phi(I_\mu(\mathbf{R}), J_\mu(\mathbf{R}, \mathbf{r})),$$

dove $J(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ è lo jacobiano della trasformazione F_μ data da $F_\mu : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}^6$, $F_\mu(\mathbf{R}, \mathbf{r}) := (I_\mu(\mathbf{R}), J_\mu(\mathbf{R}, \mathbf{r}))$. Poniamo anche $\phi_\mu : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$, $\phi_\mu(R) := R(1 + \mu s(R))$. Definiamo la distorsione analitica di un operatore A come

$$A_\mu := S_\mu A S_\mu^{-1}.$$

Siamo ora in grado di comprendere i due risultati principali del lavoro [4] di Grecchi, Kovarik, Martinez, Sacchetti e Sordoni. Nel seguito, P_μ e P_D indicano rispettivamente la distorsione analitica di P e la sua realizzazione di Dirichlet sull'intervallo $[0, R_1^M]$, con R_1^M punto di massimo per V_1 .

Teorema 2.1. *Siano $0 < \alpha \ll 1$ e $\mathcal{J} \subset (0, 1]$, con $0 \in \overline{\mathcal{J}}$, tali che esiste una funzione $a(h) > 0$ definita per $h \in \mathcal{J}$ per cui*

$$\forall \epsilon > 0, \exists C_\epsilon > 0 : a(h) \geq \frac{1}{C_\epsilon} e^{-\epsilon/h} \text{ per } h \in \mathcal{J}, 0 < h \ll 1;$$

allora vale che

$$\text{Sp}(P_D) \cap [m_2 + \alpha - 2a(h), m_2 + \alpha + 2a(h)] = \emptyset.$$

Poniamo

$$\Omega(h) := \left\{ z \in \mathbb{C}; \text{dist}(\text{Re } z, [m_1, m_2 + \alpha]) < a(h), |\text{Im } z| < Ch \ln \frac{1}{h} \right\},$$

con $C \gg 1$. Allora esistono $\delta_0 > 0$ e una biezione

$$b : \text{Sp}(P_D) \cap [m_1, m_2 + \alpha] \rightarrow \text{Sp}(P_\mu) \cap \Omega(h),$$

tali che

$$b(\lambda) - \lambda = \mathcal{O}(e^{-\delta_0/h}),$$

uniformemente per $h \in \mathcal{J}$.

Dimostrazione. Si veda la dimostrazione della proposizione 4.2 in [4]. □

Dunque, le risonanze di P in $\Omega(h)$ coincidono, a meno di un termine d'errore esponenzialmente piccolo, agli autovalori di P_D nell'intervallo $[m_1, m_2 + \alpha]$. Ma possiamo dire ancora di più.

Teorema 2.2. *Per $0 < h \ll 1$ le risonanze di P con parte reale in $[m_1, m_2 + \alpha]$ e parte immaginaria $\ll |h \ln h|$ coincidono, a meno di un termine d'errore $\mathcal{O}(h^2)$, con gli autovalori delle realizzazioni di Dirichlet di $P_{1,0}$ e $P_{2,0}$ su $(0, R_1^M)$,*

Dimostrazione. Si vedano le pagine precedenti al teorema 4.8 in [4]. □

Capitolo 3

Il modello pluridimensionale

Iniziamo in questo capitolo ad affrontare il nocciolo originale della tesi, descrivendo il modello con potenziale a buche sovrapposte su cui lavoreremo in seguito.

Prima di descrivere il potenziale a buche sovrapposte, diamo alcune nozioni preliminari. Sia $f = f(x, \xi) \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n}; \mathbb{R})$, definito H_f da $\langle df(x, \xi), u \rangle = \sigma(u, H_f(x, \xi))$ per ogni $u \in T_{x, \xi} \mathbb{R}^{2n}$ con σ forma simplettica canonica, la trasformazione canonica $(x, \xi) \rightarrow \exp tH_f(x, \xi)$ è il flusso hamiltoniano associato a f .

Definizione 3.1. Un punto $(x, \xi) \in \mathbb{R}^{2n}$ si dice ‘non-trapping’ per f se

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} |\exp tH_f(x, \xi)| = \infty.$$

Un sottoinsieme $\Omega \subset \mathbb{R}^{2n}$ si dice ‘non-trapping’ per f se ogni $(x, \xi) \in \mathbb{R}^{2n}$ è ‘non-trapping’ per f . Si dice impropriamente anche che un insieme $I \subset \mathbb{R}$ è ‘non-trapping’ per f se $f^{-1}(I)$ è ‘non-trapping’ per f .

Siano ora $V_1, V_2 \in C^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ tali che:

- $V_2 > V_1$;
- esiste $m_2 := \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} V_2(\mathbf{x})$;
- esistono $l_2 := \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \infty} V_2(\mathbf{x})$ ed $l_1 := \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \infty} V_1(\mathbf{x})$, e $l_1 < m_2 < l_2$;
- l’insieme $\{V_1 < m_2\}$ è l’unione disgiunta di un aperto limitato connesso U , detto ‘buca’, e di un aperto non-limitato \mathcal{M} , detto ‘mare’:

$$\{V_1 < m_2\} = U \cup \mathcal{M};$$

- sopra \mathcal{M} , m_2 è non-trapping per la funzione energia della prima molecola, ovvero l’insieme $(\mathcal{M} \times \mathbb{R}^n) \cap \{\xi^2 + V_1 = m_2\}$ è ‘non-trapping’ per l’hamiltoniana $\xi^2 + V_1(R)$.

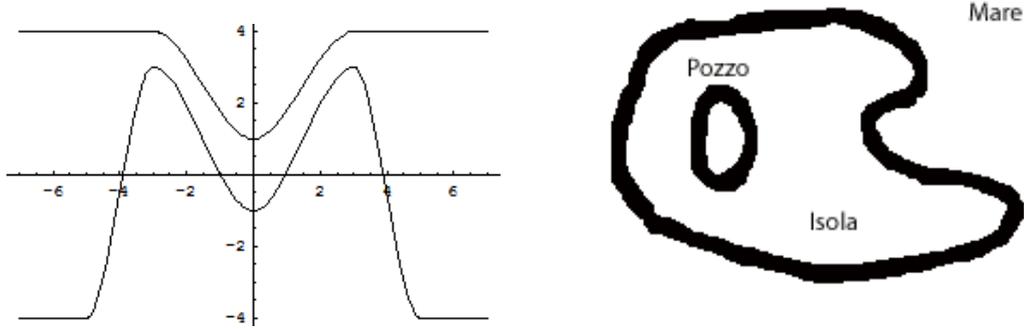


Figura 3.1: Sezione di due possibili potenziali V_1 e V_2 , e vista ‘dall’alto’.

Consideriamo ora l’operatore matriciale P sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C}) \otimes L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$ con

$$P = h^2 D_{\mathbf{x}}^2 I_2 + \begin{pmatrix} 0 & \alpha(\mathbf{x}) \cdot h^2 D_{\mathbf{x}} \\ h^2 D_{\mathbf{x}} \cdot \overline{\alpha(\mathbf{x})} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_1(\mathbf{x}) & 0 \\ 0 & V_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix},$$

dove $\alpha \in C_b^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{C}^n)$, $|\alpha(x)| \rightarrow 0$ se $|x| \rightarrow \infty$, e cerchiamo le soluzioni dell’equazione agli autovalori

$$P\phi(\mathbf{x}) = \lambda\phi(\mathbf{x}), \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad \phi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \phi_1(\mathbf{x}) \\ \phi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Se poniamo $P_j = h^2 D_{\mathbf{x}}^2 + V_j(\mathbf{x})$ per $j = 1, 2$, l’equazione (3.1) diventa

$$(P_1 - \lambda)\phi_1(\mathbf{x}) = -h\alpha(\mathbf{x})D_{\mathbf{x}}\phi_2(\mathbf{x}), \quad (P_2 - \lambda)\phi_2(\mathbf{x}) = -h\overline{\alpha(\mathbf{x})}D_{\mathbf{x}}\phi_1(\mathbf{x}).$$

Per il teorema di Weyl, che afferma che una perturbazione relativamente compatta lascia invariato lo spettro essenziale di un operatore autoaggiunto, abbiamo che

$$\text{Sp}_{ess}(P) = \text{Sp}_{ess}(h^2 D_{\mathbf{x}}^2 I_2 + V(\mathbf{x})),$$

e quindi che

$$\text{Sp}_{ess}(P) = \text{Sp}_{ess}(h^2 D_{\mathbf{x}}^2 + V_1(\mathbf{x})) \cup \text{Sp}_{ess}(h^2 D_{\mathbf{x}}^2 + V_2(\mathbf{x})).$$

Riutilizzando il teorema di Weyl otteniamo che

$$\text{Sp}_{ess}(P) = [l_1, +\infty) \cup [l_2, +\infty) = [l_1, +\infty).$$

Vogliamo ora studiare le risonanze $\lambda \in [m_2, m_2 + \alpha]$ dell’operatore P . Per distorcerlo dobbiamo assumere che

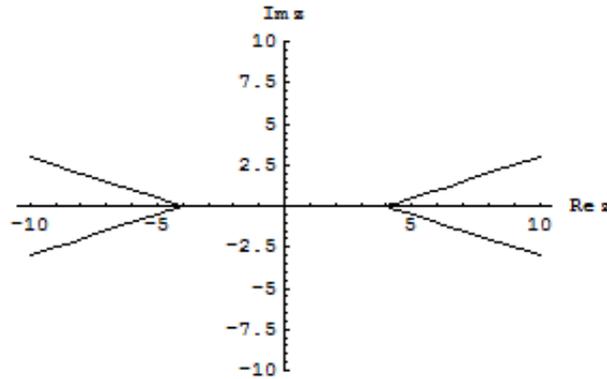


Figura 3.2: Settore Σ nel piano complesso con $C = 4$.

- V_1, V_2 e α sono olomorfi in un settore del tipo $\Sigma := \{|\operatorname{Re} x| \geq C, |\operatorname{Im} x| < 1/C|\operatorname{Re} x|\}$;
- valgono per $j = 1, 2$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty, \mathbf{x} \in \Sigma} V_j(\mathbf{x}) = l_j, \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty, \mathbf{x} \in \Sigma} \alpha(\mathbf{x}) = 0;$$

In questo modo possiamo definire P_μ il cui spettro essenziale è

$$Sp_{\text{ess}}(P_\mu) = e^{-i\mu}[l_1; +\infty) \cup e^{-i\mu}[l_2; +\infty).$$

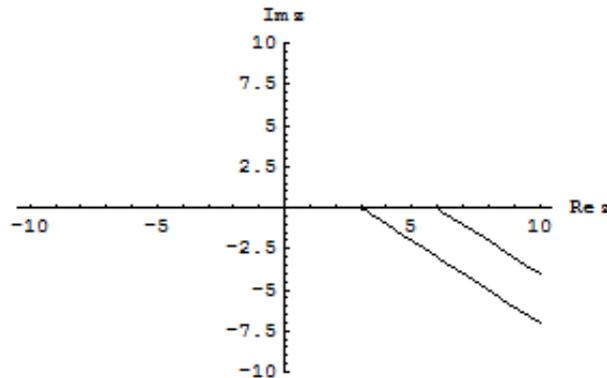


Figura 3.3: Piano complesso con spettro essenziale dell'operatore distorto P_μ dove $\mu = 1$, $l_1 = 3$ ed $l_2 = 6$.

Capitolo 4

La riduzione a un problema autoaggiunto

In questo capitolo mostriamo che gli autovalori di P_μ con parte reale in $[m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]$ coincidono, a meno di un termine d'errore esponenzialmente piccolo, con gli autovalori della realizzazione di Dirichlet P_D di P su un aperto $B \subset \mathbb{R}^n$ che sia contenuto nell'isola e che contenga la buca. Per $\lambda < m_2 - \alpha$, il problema si può ridurre a uno scalare, visto che $P_2 \geq m_2$ come operatore.

Proposizione 4.1. *Siano $0 < \alpha \ll 1$, e $\mathcal{J} \subset (0, 1]$, con $0 \in \overline{\mathcal{J}}$, tali che esiste una funzione $a(h) > 0$ definita per $h \in \mathcal{J}$ e tale che*

$$\forall \epsilon > 0, a(h) \geq \frac{1}{C_\epsilon} e^{-\epsilon/h} \forall h \ll 1,$$

e che

$$\text{Sp}(P_D) \cap [m_1 + \alpha - 2a(h), m_1 + \alpha + 2a(h)] = \emptyset = \text{Sp}(P_D) \cap [m_2 + \alpha - 2a(h), m_2 + \alpha + 2a(h)].$$

Posto

$$\Omega(h) := \left\{ z \in \mathbb{C}; \text{dist}(\text{Re}[z], [m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]) < a(h), \|\text{Im}[z]\| < Ch \ln \frac{1}{h} \right\}$$

con $C \gg 1$, allora esistono $\delta_0 > 0$ e una biezione

$$b : \text{Sp}(P_D) \cap [m_2 - \alpha, m_2 + \alpha] \longrightarrow \text{Sp}(P_\mu) \cap \Omega(h)$$

tali che

$$b(\lambda) - \lambda = \mathcal{O}(e^{-\delta_0/h}),$$

uniformemente per $h \in \mathcal{J}$.

Dimostrazione. Riempiamo innanzitutto la buca del pozzo: consideriamo un aperto $B \subset \mathbb{R}^n$ che sia contenuto nell'isola e che contenga la buca, e fissiamo una funzione $F = F(\mathbf{x}) \in C_0^\infty(B; \mathbb{R}_+)$ tale che

$$\inf_{\mathbf{x} \in B} (V_1 + F)(\mathbf{x}) > m_2 + \alpha.$$

Per $j = 1, 2$, indichiamo poi con $p_{j\mu} = p_{j,\mu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*)$ il simbolo principale dell'operatore distorto $P_{j,\mu}$, simbolo che supponiamo analitico.

Ora, usando il fatto che l'intero intervallo energetico $[m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]$ è 'non-trapping' per l'operatore $P_{1,\mu} + F(\mathbf{x})$, seguendo la sezione 4 di [10] possiamo costruire una funzione reale $f_0 = f_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) \in C_0^\infty((\mathbb{R}^n \setminus \text{Supp} F) \times \mathbb{R}^n)$ tale che sull'insieme

$$\{(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) \in \mathbb{R}^6; F(\mathbf{x}) + \text{Re}[p_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*)] \in [m_2 - \alpha - \delta; m_2 + \alpha + \delta]\}, \quad \text{con } 0 < \delta \ll 1,$$

si ha

$$-\text{Im} \left[p_{1,\mu} \left(\mathbf{x} - h \ln \frac{1}{h} (\nabla_{\mathbf{x}} f_0 + i \nabla_{\mathbf{x}^*} f_0); \mathbf{x}^* - h \ln \frac{1}{h} (\nabla_{\mathbf{x}} f_0 - i \nabla_{\mathbf{x}^*} f_0) \right) \right] \geq \frac{1}{\delta} h \ln \frac{1}{h}.$$

Di conseguenza, se $z \in \mathbb{C}$ è tale che $\text{dist}(z, [m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]) = \mathcal{O}(|h \ln h|)$, allora l'operatore $P_{1,\mu} + F(\mathbf{x}) - z$ è invertibile su $L^2(\mathbb{R}^n)$ d'inverso che soddisfa

$$\|h^{-f_0} T(P_{1,\mu} + F(\mathbf{x}) - z)^{-1} u\|_{L^2(\mathbb{R}^6)} \leq C |h \ln h|^{-1} \|h^{-f_0} T u\|_{L^2(\mathbb{R}^6)}, \quad (4.1)$$

dove $C > 0$ è una costante e

$$T : L^2(\mathbb{R}^n) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^6), \quad T u(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) := \frac{1}{2\pi h} \int e^{i \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{x}^*}{h} - \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{2h}} u(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'$$

è la trasformata F.B.I., ovvero la trasformata di Fourier-Bros-Iagolnitzer (cfr. capitolo 3 in [8]). Equivalentemente, per $v = (P_{1,\mu} + F(\mathbf{x}) - z)^{-1} u$ al variare di $u \in L^2$ abbiamo che

$$\|h^{-f_0} T v\|_{L^2(\mathbb{R}^6)} \leq C |h \ln h|^{-1} \|h^{-f_0} T(P_{1,\mu} + F(\mathbf{x}) - z) v\|_{L^2(\mathbb{R}^6)},$$

e per densità possiamo estendere una tale stima a ogni $v \in (H^2 \cap H_0^1)(\mathbb{R}^n)$. Ora, la disuguaglianza (4.1) vale per $v = (P_{1,\mu} + F(\mathbf{x}) - z)^{-1} u$ al variare di $u \in L^2$. Questo significa che l'operatore $(P_{1,\mu} + F(\mathbf{x}) - z)^{-1}$ ha norma $\mathcal{O}(|h \ln h|^{-1})$ se lo consideriamo sullo spazio $L^2(\mathbb{R}^n)$ con la norma

$$\|u\|_{\mathcal{H}} := \|h^{-f_0} T u\|_{L^2(\mathbb{R}^6)}.$$

D'altro canto, per costruzione, l'operatore $P_{2,\mu} + F(\mathbf{x})$ ha parte reale maggiore di $m_2 + \alpha$, e così, se $\text{Re}[z] \leq m_2 + \alpha$, vediamo anche che l'operatore $(P_{2,\mu} + F(\mathbf{x}) - z)^{-1}$ ha norma uniformemente limitata su \mathcal{H} .

Ora, scegliamo due funzioni $\chi_1, \chi_2 \in C_0^\infty(B; [0, 1])$ tali che $\chi_1 = 1$ in un intorno di $\text{Supp}(\chi_2)$ e $\chi_2 = 1$ in un intorno di $\text{Supp}(F)$. Ponendo

$$Q_\mu := P_\mu + F(\mathbf{x}); \quad R_\mu(z) := \chi_1(P_D - z)^{-1}\chi_2 + (Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2), \quad (4.2)$$

vediamo che, se $\text{dist}(z, \text{Sp}(P_D)) \geq a(h)$, allora

$$(P_\mu - z)R_\mu(z) = I + K_\mu(z)$$

dove

$$K_\mu(z) \stackrel{\text{def}}{=} [P_D, \chi_1](P_D - z)^{-1}\chi_2 - F(\mathbf{x})(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2)$$

perchè

$$\begin{aligned} (P_\mu - z)R_\mu(z) &= (P_\mu - z)\chi_1(P_D - z)^{-1}\chi_2 + (P_\mu - z)(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2) = \\ &= (P_D - z)\chi_1(P_D - z)^{-1}\chi_2 + (Q_\mu - F(\mathbf{x}) - z)(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2) = \\ &= (P_D - z)\chi_1(P_D - z)^{-1}\chi_2 + (Q_\mu - z)(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2) - F(\mathbf{x})(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2) = \\ &= [P_D, \chi_1](P_D - z)^{-1}\chi_2 + \chi_1(P_D - z)(P_D - z)^{-1}\chi_2 + (I - \chi_2) - F(\mathbf{x})(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2) = \\ &= [P_D, \chi_1](P_D - z)^{-1}\chi_2 + \chi_1\chi_2 + (I - \chi_2) - F(\mathbf{x})(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2) = \\ &= [P_D, \chi_1](P_D - z)^{-1}\chi_2 + \chi_2 + (I - \chi_2) - F(\mathbf{x})(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2) = \\ &= I + [P_D, \chi_1](P_D - z)^{-1}\chi_2 - F(\mathbf{x})(Q_\mu - z)^{-1}(1 - \chi_2). \end{aligned}$$

Ora, $[P_D, \chi_1]$ è un operatore differenziale i cui coefficienti hanno supporto in quello del gradiente di χ_1 ; quest'ultimo è però disgiunto dal supporto di χ_2 , dunque il primo addendo di $K_\mu(z)$ è nullo. Anche $F(\mathbf{x})$ e $1 - \chi_2$ hanno supporti disgiunti e separati da una regione in cui $\inf V_1 > m_2 + \alpha$. Possiamo allora applicare la stima di Agmon

$$\text{Re} \langle e^{\phi/h}(-h^2\Delta + V_1 - E)u, e^{\phi/h}u \rangle = \|h\nabla(e^{\phi/h})\|^2 + \langle (V_1 - E - |\nabla\phi|^2)e^{\phi/h}u, e^{\phi/h}u \rangle, \quad (4.3)$$

per ottenere (cfr. [6]) la stima

$$\|K_\mu(z)\|_{\mathcal{H}} = \mathcal{O}(e^{-2\delta/h}).$$

Per tali valori di z e per valori di h sufficientemente piccoli, abbiamo

$$(P_\mu - z)^{-1} = R_\mu(z) \sum_{j \geq 0} (-K_\mu(z))^j, \quad (4.4)$$

e dal momento che per ogni tale z esiste una certa costante $C > 0$ tale che $\|R_\mu(z)\|_{\mathcal{H}} = \mathcal{O}(1/a(h))$, deduciamo che se γ è un cammino chiuso orientato semplice attorno a

$\text{Sp}(P_D) \cap [m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]$ tale che $\text{dist}(\gamma, \text{Sp}(P_D)) \geq a(h)$ e $\text{dist}(\gamma, [m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]) \ll |h \ln h|$, allora

$$\begin{aligned}
\Pi_\mu &:= \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma (z - P_\mu)^{-1} dz = -\frac{1}{2\pi i} \int_\gamma R_\mu(z) dz - \frac{1}{2\pi i} \sum_{j \geq 1} \int_\gamma R_\mu(z) (-K_\mu(z))^j dz = \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \chi_1 (z - P_D)^{-1} \chi_2 dz - \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma (Q_\mu - z)^{-1} (1 - \chi_2) dz + \mathcal{O}(e^{-2\delta/h}) \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \chi_1 (z - P_D)^{-1} \chi_2 dz + \mathcal{O}(e^{-2\delta/h}) = \chi_1 \Pi_D \chi_2 + \mathcal{O}(e^{-2\delta/h}). \tag{4.5}
\end{aligned}$$

con $(Q_\mu - z)^{-1}$ olomorfo nell'interno di γ e

$$\Pi_D := \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma (z - P_D)^{-1} dz.$$

Così,

$$\|\Pi_\mu - \chi_1 \Pi_D \chi_2\| \ll 1$$

da cui segue che Π_μ e $\chi_1 \Pi_D \chi_2$ hanno lo stesso rango.

Dal momento che Π_μ è il proiettore spettrale di P_μ associato a $\Omega(h)$, le corrispondenti risonanze di P non sono altro che gli autovalori di $P_\mu \Pi_\mu$ ristretto all'immagine di Π_μ . Inoltre, se poniamo $\{\mu_1, \dots, \mu_m\} := \text{Sp}(P_D) \cap [m_1, m_2 + \alpha]$ e indichiamo con $\{\phi_1, \dots, \phi_m\}$ una base ortonormale di $\bigoplus \text{Ker}(P_D - \mu_j)$, allora per le stima di Agmon (4.3) vediamo dalla (4.5) che le funzioni $\Pi_\mu \chi_1 \phi_j$, $j = 1, \dots, m$, formano una base di $\text{Im}(\Pi_\mu)$, e la matrice di $P_\mu|_{\text{Im}(\Pi_\mu)}$ in questa base è della forma $\text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_m) + \mathcal{O}(e^{-\delta/h})$. Il risultato segue dal fatto che $m = \mathcal{O}(h^{-n})$ e dal seguente argomento sugli autovalori di matrici:

Lemma 4.2. *Siano M ed N due matrici di dimensione $d = \mathcal{O}(h^{-n})$ tali che:*

- i.* $M = \text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_d)$;
- ii.* $\|M\| + \|N\| = \mathcal{O}(1)$;
- iii.* $\exists c, \delta > 0 : \|M - N\| \leq ce^{-\delta/h}$.

Allora esistono $\delta' > 0$ e una biezione

$$\beta : \text{Sp}(M) \longrightarrow \text{Sp}(N)$$

tale che

$$|\lambda - \beta(\lambda)| = \mathcal{O}(e^{-\delta'/h})$$

Dimostrazione. Innanzitutto mostriamo che $\text{Sp}(M) \subset \bigcup B(\mu_j; 2ce^{-\delta/h})$ facendo vedere che

$$\mathbb{C} \setminus \bigcup_{j=1}^d B(\mu_j; 2ce^{-\delta/h}) \subset \rho(M).$$

Infatti, se $|z - \mu_j| \geq 2ce^{-\delta/h}$ allora, posto $R := M - N$, abbiamo che $N - z = M - z + R = (I + R(M - z)^{-1})(M - z)$ è invertibile perchè

$$\|R(M - z)^{-1}\| \leq \frac{1}{2ce^{-\delta/h}} ce^{-\delta/h} = \frac{1}{2}.$$

Definiamo poi per $t \in [0, 1]$ la deformazione continua rispetto a t

$$T_t := (1 - t)N + tM$$

della matrice $T_0 = M$ nella matrice $T_1 = N$. È noto che in questi casi gli autovalori $\lambda_j(t)$, $j = 1, \dots, d$, di T_t sono tali che per ogni $j = 1, \dots, d$:

- $\lambda_j(0) = \mu_j$;
- $\lambda_j(t)$ dipendono con continuità dal parametro $t \in [0, 1]$;
- $\lambda_j(1)$ appartengono all'unione delle palle $B(\mu_j; 2ce^{-\delta/h})$.

Dunque, vale che $|\text{Im}(\lambda_j(t))| \leq 2ce^{-\delta/h}$ per ogni $j = 1, \dots, d$ e per ogni $t \in [0, T]$, e che l'unione delle parti reali delle palle $B(\mu_j; 2ce^{-\delta/h})$ è l'unione disgiunta di intervalli $I_k(h)$

$$\bigcup_{j=1}^d \text{Re}(B(\mu_j; 2ce^{-\delta/h})) = \bigcup_{k=1}^{d'} I_k(h)$$

con $I_k(h)$ tali che

$$|I_k(h)| \leq \sum_{j=1}^d |\lambda_j(1) - \mu_j| = \sum_{j=1}^d |\lambda_j(1) - \lambda_j(0)| \leq \sum_{j=1}^d 2ce^{-\delta/h} = d2ce^{-\delta/h} = 2ch^{-n}e^{-\delta/h}.$$

Allora per ogni $j = 1, \dots, d$ e per ogni $t \in [0, 1]$ $\text{Re}(\lambda_j(t))$ e $\mu_j = \text{Re}\lambda_j(0)$ appartengono per continuità allo stesso intervallo $I_k(h)$, quindi $|\mu_j - \text{Re}(\lambda_j(t))| \leq 2ch^{-n}e^{-\delta/h}$. Dunque, nel caso di $t = 1$, per ogni $j = 1, \dots, d$ $\text{Re}(\lambda_j(1))$ e $|\mu_j - \lambda_j(1)| \leq 4ch^{-n}e^{-\delta/h}$. Basta infine definire la biezione b tramite

$$b(\mu_j) = \lambda_j(1).$$

□

Dal lemma appena dimostrato e da quanto precede rimane dimostrato il teorema. \square

Ora, sfruttando il fatto che sia $V_1(R_1^M)$ sia $V_2(R_1^M)$ sono maggiori di m_2 , consideriamo due funzioni $\tilde{V}_j \in C^\infty(\mathbb{R}^n; \mathbb{R})$, per $j = 1, 2$, tali che

- $\tilde{V}_j = V_j$ sulla palla B ;
- \tilde{V}_j è costante su $\mathbb{R}^2 \setminus B$;

-

$$\inf_{\mathbb{R}^n \setminus B} \tilde{V}_j(\mathbf{x}) > m_2.$$

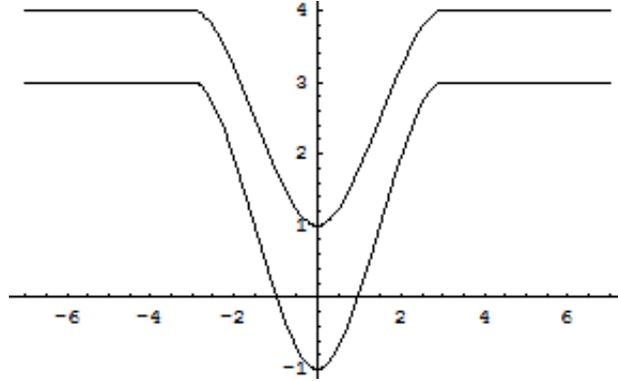


Figura 4.1: Sezione di due possibili potenziali \tilde{V}_1 e \tilde{V}_2 .

Dopo aver sostituito V_1, V_2 in P con \tilde{V}_1, \tilde{V}_2 si ottiene l'operatore matriciale autoaggiunto

$$\tilde{P} = h^2 D_{\mathbf{x}}^2 I_2 + \begin{pmatrix} 0 & \alpha(\mathbf{x}) \\ \alpha(\mathbf{x}) & 0 \end{pmatrix} h^2 D_{\mathbf{x}} + \begin{pmatrix} \tilde{V}_1(\mathbf{x}) & 0 \\ 0 & \tilde{V}_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix},$$

lo stesso ragionamento della proposizione precedente mostra che, sotto le stesse condizioni, lo spettro di P_D e lo spettro di \tilde{P} coincidono in $[m_2, m_2 + \alpha]$ a meno di un termine d'errore esponenzialmente piccolo. Perciò, al fine di conoscere le risonanze di P in $\Omega(h)$, sempre a meno di un termine d'errore esponenzialmente piccolo, è sufficiente studiare gli autovalori λ di \tilde{P} in $[m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]$. Per $j = 1, 2$, definiamo l'operatore $(\tilde{P}_j, \mathcal{H}')$ come

$$\tilde{P}_j := -h^2 \Delta + \tilde{V}_j, \quad \mathcal{H}' = L^2(\mathbb{R}^n).$$

Con gli stessi argomenti della dimostrazione precedente, ora semplificati dal momento che P_D e \tilde{P} sono autoaggiunti, possiamo mettere in corrispondenza biunivoca gli spettri anche di questi due nuovi operatori, a meno di un termine d'errore sempre esponenzialmente piccolo. Il problema della ricerca delle risonanze di P è dunque ricondotto allo studio degli autovalori di \tilde{P} .

Capitolo 5

Stima dell'interazione

La ricerca delle risonanze di P dà modo di parlare di una tecnica dovuta al matematico russo contemporaneo Victor Vasilievich Grushin. Il problema di Grushin riguarda la riduzione di un'equazione lineare - come l'equazione di Schrödinger - a un'equazione per un sottospazio finito-dimensionale dello spazio di Hilbert di partenza.

Indichiamo con $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_l)$ una famiglia ortonormale di autofunzioni di \tilde{P}_1 con autovalori nell'intervallo $[m_2 - 2\alpha, m_2 + 2\alpha]$ e con $\psi = (\psi_1, \dots, \psi_m)$ una famiglia ortonormale di autofunzioni di \tilde{P}_2 con autovalori nell'intervallo $[m_2, m_2 + 2\alpha]$. Poniamo

$$R_- : \mathbb{C}^l \otimes \mathbb{C}^m \longrightarrow \mathcal{H}, \quad R_-(\alpha \otimes \beta) := \alpha \cdot \phi \otimes \beta \cdot \psi,$$

dove abbiamo usato la notazione $\alpha \cdot \phi = \sum \alpha_i \phi_i$, $\beta \cdot \psi = \sum \beta_j \psi_j$. Indichiamo poi con R_+ l'aggiunto di R_- , dato da

$$R_+ : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}^l \otimes \mathbb{C}^m, \quad R_+(u \otimes v) := (\langle u, \phi_k \rangle)_{k=1}^l \otimes (\langle v, \psi_l \rangle)_{l=1}^m.$$

Osserviamo che

$$R_- R_+ = I_{\mathcal{H}}, \quad R_+ R_- = I_{\mathbb{C}^l \oplus \mathbb{C}^m}.$$

Ora, consideriamo la matrice di operatori

$$G(\lambda) := \begin{pmatrix} \tilde{P} - \lambda & R_- \\ R_+ & 0 \end{pmatrix} \quad \text{su} \quad \mathcal{H} \otimes \mathbb{C}^l \otimes \mathbb{C}^m,$$

per $\lambda \in [m_2 - \alpha; m_2 + \alpha]$, e cerchiamo di capire se essa è invertibile.

Indichiamo con Π_1 e Π_2 le proiezioni ortogonali sui sottospazi S_l e S_m di $L^2(\mathbb{R}^n)$ delle combinazioni lineari delle autofunzioni ϕ_i e delle ψ_j rispettivamente, e poniamo

$$\Pi := \begin{pmatrix} \Pi_1 & 0 \\ 0 & \Pi_2 \end{pmatrix}.$$

Chiaramente rimane definito anche l'ortogonale del proiettore

$$\Pi^\perp = \begin{pmatrix} \Pi_1^\perp & 0 \\ 0 & \Pi_2^\perp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \Pi_1 & 0 \\ 0 & 1 - \Pi_2 \end{pmatrix}.$$

Osserviamo che

$$\Pi\Pi^\perp = \Pi^\perp\Pi = 0.$$

Proviamo innanzitutto il seguente

Lemma 5.1. *Per $\lambda \in [m_2 - \alpha; m_2 + \alpha]$, l'operatore*

$$\tilde{P}^\perp - \lambda := \Pi^\perp \tilde{P} \Pi^\perp - \lambda$$

è invertibile sull'immagine di Π^\perp , e il suo inverso $(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}$ è uniformemente limitato.

Dimostrazione. Abbiamo che

$$\begin{aligned} \Pi^\perp(\tilde{P} - \lambda)\Pi^\perp &= \begin{pmatrix} \Pi_1^\perp & 0 \\ 0 & \Pi_2^\perp \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{P}_1 - \lambda & hA_0 \\ hA_0^* & \tilde{P}_2 - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Pi_1^\perp & 0 \\ 0 & \Pi_2^\perp \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \Pi_1^\perp & 0 \\ 0 & \Pi_2^\perp \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\tilde{P}_1 - \lambda)\Pi_1^\perp & hA_0\Pi_2^\perp \\ hA_0^*\Pi_1^\perp & (\tilde{P}_2 - \lambda)\Pi_2^\perp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Pi_1^\perp(\tilde{P}_1 - \lambda)\Pi_1^\perp & h\Pi_1^\perp A_0 \Pi_2^\perp \\ h\Pi_2^\perp A_0^* \Pi_1^\perp & \Pi_2^\perp(\tilde{P}_2 - \lambda)\Pi_2^\perp \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

e, indicando con \tilde{P}_j^\perp la restrizione di \tilde{P}_j all'immagine di Π_j^\perp , poichè \tilde{P} è autoaggiunto e

$$\text{dist}(\lambda, \mathbb{R} \setminus [m_2 - 2\alpha, m_2 + 2\alpha]) \geq \alpha,$$

allora $\tilde{P}_j^\perp - \lambda$ è invertibile, e il suo inverso è uniformemente limitato rispetto alla norma $\|u\|_{H^2}^2 := \|h^2 \Delta u\|_{L^2}^2 + \|u\|_{L^2}^2$. Di conseguenza, $A_0 \Pi_2^\perp (\tilde{P}_2^\perp - \lambda)^{-1} \Pi_2^\perp$ e $A_0 \Pi_1^\perp (\tilde{P}_1^\perp - \lambda)^{-1} \Pi_1^\perp$ sono uniformemente limitati su $L^2(\mathbb{R}^n)$ (insieme ai loro aggiunti), e troviamo che

$$\begin{aligned} \Pi^\perp(\tilde{P} - \lambda)\Pi^\perp \begin{pmatrix} (\tilde{P}_1^\perp - \lambda)^{-1} & 0 \\ 0 & (\tilde{P}_2^\perp - \lambda)^{-1} \end{pmatrix} \Pi^\perp &= \Pi^\perp(1 + \mathcal{O}(h))\Pi^\perp; \\ \Pi^\perp \begin{pmatrix} (\tilde{P}_1^\perp - \lambda)^{-1} & 0 \\ 0 & (\tilde{P}_2^\perp - \lambda)^{-1} \end{pmatrix} \Pi^\perp(\tilde{P} - \lambda)\Pi^\perp &= \Pi^\perp(1 + \mathcal{O}(h))\Pi^\perp. \end{aligned}$$

Così, il risultato segue prendendo la restrizione all'immagine di Π^\perp e utilizzando la serie di Neumann per invertire $\Pi^\perp(1 + \mathcal{O}(h))\Pi^\perp|_{\text{Im}\Pi^\perp} = (1 + \Pi^\perp \mathcal{O}(h))|_{\text{Im}\Pi^\perp}$. \square

Così, rimane dimostrato che $\text{Sp}(P_1^\perp) \subset \mathbb{R} \setminus [m_2 - 2\alpha; m_2 + 2\alpha]$, e quindi per ogni $\lambda \in [m_2 - \alpha; m_2 + \alpha]$ accade che

$$\|(P_1^\perp - \lambda)^{-1}\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\text{dist}(\lambda; \text{Sp}(P_1^\perp))}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\alpha}\right) = \mathcal{O}(1).$$

Utilizzando il lemma precedente, si vede che $G(\lambda)$ è invertibile, d'inverso

$$G(\lambda)^{-1} := \begin{pmatrix} \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp & (1 - \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P})R_- \\ R_+(1 - \tilde{P}\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp) & \lambda - Q(\lambda) \end{pmatrix}.$$

dove

$$Q(\lambda) := R_+\tilde{P}(1 - \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P})R_- : \mathbb{C}^l \otimes \mathbb{C}^m \longrightarrow \mathbb{C}^l \otimes \mathbb{C}^m, \quad (5.1)$$

è una matrice di dimensione $(l + m) \times (l + m)$ con $l, m = \mathcal{O}(h^{-n})$. Infatti

$$G(\lambda)G^{-1}(\lambda) = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}$$

con

$$\begin{aligned} G_{11} &= (\tilde{P} - \lambda)\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp + R_-R_+(1 - \tilde{P}\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp) = \\ &= (\tilde{P} - \lambda)\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp + 1 - \tilde{P}\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp = 1 - \lambda\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp; \\ G_{12} &= (\tilde{P} - \lambda)(1 - \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P})R_- + R_-(\lambda - R_+\tilde{P}(1 - \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P})R_-) = \\ &= (\tilde{P} - \lambda)(1 - \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P})R_- + \lambda R_- - \tilde{P}(1 - \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P})R_- = \\ &= \lambda R_- - \lambda(1 - \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P})R_- = \lambda\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P}R_-; \\ G_{21} &= R_+\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp; \\ G_{22} &= R_+(1 - \Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P})R_- = I - R_+\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P}R_-, \end{aligned}$$

ovvero

$$G(\lambda)G^{-1}(\lambda) = I + \begin{pmatrix} -\lambda\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp & \lambda\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P}R_- \\ R_+\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp & -R_+\Pi^\perp(\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1}\Pi^\perp\tilde{P}R_- \end{pmatrix},$$

dove dal lemma precedente segue che la norma della seconda matrice è esponenzialmente piccola. Si mostra del tutto analogamente il caso di $G(\lambda)G^{-1}(\lambda)$.

Abbiamo così ridotto il problema agli autovalori sullo spazio infinito-dimensionale \mathcal{H} a un equivalente problema sullo spazio finito-dimensionale $\mathbb{C}^l \otimes \mathbb{C}^m$.

Dunque le risonanze di P nel settore $\{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}(z) \in [m_2 - \alpha, m_2 + \alpha], |\operatorname{Im}(z)| \leq Ch \ln h^{-1}\}$ sono i valori di λ nello stesso intervallo tali che $Q(\lambda)$ ha zero come autovalore, dove $Q(\lambda)$ è l'operatore finito-dimensionale (quindi, la matrice) definita precedentemente.

Proposizione 5.2. *Vale che*

$$Q(\lambda) = \begin{pmatrix} E_{1,1} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & E_{1,l} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & E_{2,1} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & E_{2,m} \end{pmatrix} + S(\lambda),$$

dove $E_{1,j}, E_{2,k} \in [m_2 - 2\alpha, m_2 + 2\alpha]$ sono gli autovalori associati a ϕ_j e ψ_k rispettivamente, e con

$$\|S(\lambda)\| + \left\| \frac{d}{d\lambda} S(\lambda) \right\| = \mathcal{O}(h^2),$$

nel senso della norma degli operatori su \mathbb{C}^{l+m} , e uniformemente rispetto a $0 < h \ll 1$ e $l, m = \mathcal{O}(h^{-n})$.

Dimostrazione. Dal momento che $R_+ \Pi^\perp = 0 = \Pi^\perp R_-$, per (5.1) abbiamo che

$$Q(\lambda) = R_+ \tilde{P} R_- - R_+ \Pi \tilde{P} \Pi^\perp (\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-1} \Pi^\perp \tilde{P} \Pi R_-, \quad (5.2)$$

$$\frac{d}{d\lambda} Q(\lambda) = R_+ \Pi \tilde{P} \Pi^\perp (\tilde{P}^\perp - \lambda)^{-2} \Pi^\perp \tilde{P} \Pi R_-, \quad (5.3)$$

e, dal momento che per $j = 1, 2$ $\Pi_j \tilde{P}_j \Pi_j^\perp = 0$,

$$\Pi \tilde{P} \Pi^\perp = \begin{pmatrix} 0 & h \Pi_1 A_0 \Pi_2^\perp \\ h \Pi_2 A_0^* \Pi_1^\perp & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

Inoltre, dal fatto che $\|\tilde{P}_j \Pi_j\|_{\mathcal{L}(L^2)} \leq |m_2| + 2\alpha$ e dall'ellitticit  di \tilde{P}_j , segue che sia $A_0^* \Pi_1$ sia $A_0 \Pi_2$ sono uniformemente limitati, cos  lo sono anche i loro aggiunti $\Pi_1 A_0$ e $\Pi_2 A_0^*$, e deduciamo da (5.2)-(5.4) (e da $\|R_\pm\| \leq 1$) che vale

$$Q(\lambda) = R_+ \tilde{P} R_- + \mathcal{O}(h^2), \quad \frac{d}{d\lambda} Q(\lambda) = \mathcal{O}(h^2). \quad (5.5)$$

Perci , per completare la dimostrazione,   sufficiente mostrare il seguente

Lemma 5.3. *Per ogni $N \geq 0$ esiste una costante $C_N > 0$ tale che per ogni $j \in \{1, \dots, l\}$ e per ogni $k \in \{1, \dots, m\}$*

$$|\langle A_0 \phi_j, \psi_k \rangle| + |\langle A_0 \psi_k, \phi_j \rangle| \leq C_N h^N.$$

Dimostrazione. Usiamo le equazioni

$$(\tilde{P}_1 - E_{1,j}) \phi_j = 0, \quad (\tilde{P}_2 - E_{2,k}) \psi_k = 0. \quad (5.6)$$

Innanzitutto, osserviamo che esistono $C, X_C > 0$ tali che $W_1(\mathbf{x}) - E_{1,j} > C$ e $W_2(\mathbf{x}) - E_{2,k} > C$ per ogni $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ con $|\mathbf{x}| > X_C$. Perci , con la stima di Agmon (4.3) si vede che per $0 < h \ll 1$

$$\|\phi_j\|_{H^s(|\mathbf{x}| \geq X_C)} + \|\psi_k\|_{H^s(|\mathbf{x}| \geq X_C)} \leq e^{-c_0/h}, \quad (5.7)$$

dove la costante positiva c_0 non dipende da $j, k = \mathcal{O}(h^{-n})$, e $s \geq 0$   arbitrario.

Per $t = 1, 2$, poniamo $\tilde{p}_t(\mathbf{x}, \xi) = |\xi|^2 + \tilde{W}(\mathbf{x})$ e

$$\Sigma_t \stackrel{def}{=} \{(\mathbf{x}, \xi) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n; \tilde{p}_t(\mathbf{x}, \xi) \in [m_2 - 2\alpha, m_2 + 2\alpha]\}.$$

Scegliamo $\chi_t \in C_0^\infty(\{|\mathbf{x}| \leq 2X_C\} \times \mathbb{R}^n)$, a supporto vicino a Σ_t , tale che $\chi_t = 1$ in un intorno di Σ_t . Fissiamo anche $\chi_0 = \chi_0(\mathbf{x}) \in C_0^\infty(|\mathbf{x}| \leq 2X_C)$ tale che $\chi_0 = 1$ su $\{|\mathbf{x}| \leq 2X_C\}$.

Ora, usando il calcolo pseudodifferenziale, per ogni $E \in [m_2 - 2\alpha, m_2 + 2\alpha]$ si può costruire un simbolo $q_t(E) = q_t(E, \mathbf{x}, \xi; h)$, a supporto in $\{|\mathbf{x}| \leq 2X_C\} \times \mathbb{R}^n$ e liscia rispetto a E , tale che

$$q_t(E) \# (\tilde{p}_t - E)(\mathbf{x}, \xi) \sim \chi_0(\mathbf{x})(1 - \chi_t(\mathbf{x}, \xi)), \quad (5.8)$$

dove $\#$ indica la composizione di Weyl di simboli

$$a \# b(\mathbf{x}, \xi; h) = e^{ih[D_\eta D_{\mathbf{x}} - D_\theta D_\xi]} a(\theta, \eta) b(\mathbf{x}, \xi) \Big|_{\theta=\mathbf{x}, \eta=\xi} = a(\mathbf{x}, \xi) b(\mathbf{x}, \xi) + \frac{h}{2i} \{a, b\}(\mathbf{x}, \xi) + \mathcal{O}(h^2),$$

e l'equivalenza asintotica vale uniformemente rispetto a $E \in [m_2 - 2\alpha, m_2 + 2\alpha]$. Osserviamo che $\tilde{p}_t - E \neq 0$ sul supporto di $\chi_0(1 - \chi_1)$. Poi, moltiplicando la (5.6) per χ_0 , commutando χ_0 con \tilde{P}_j e applicando la quantizzazione di Weyl di $q_t(E)$ (con $E = E_{1,j}, E_{2,k}$ rispettivamente) deduciamo da (5.6), (5.7) e (5.8) che

$$\|Op(\chi_0(\mathbf{x})(1 - \chi_1(\mathbf{x}, \xi)))\phi_j\|_{H^s} = \mathcal{O}(h^\infty), \quad (5.9)$$

$$\|Op(\chi_0(\mathbf{x})(1 - \chi_2(\mathbf{x}, \xi)))\psi_k\|_{H^s} = \mathcal{O}(h^\infty) \quad (5.10)$$

uniformemente rispetto a j, k . Infatti, per $E = E_{1,j}$ abbiamo che $0 = \chi_0(\tilde{P}_1 - E)\phi_j = [\tilde{P}_1, \chi_0]\phi_j + (\tilde{P}_1 - E)\chi_0\phi_j$, e poichè il termine $[\tilde{P}_1, \chi_0]\phi_j$ è esponenzialmente piccolo, allora lo è anche $(\tilde{P}_1 - E)\chi_0\phi_j$. Posto allora $Q_1 = Op(q_1(E))$, abbiamo $Q_1(\tilde{P}_1 - E)\chi_0\phi_j =$

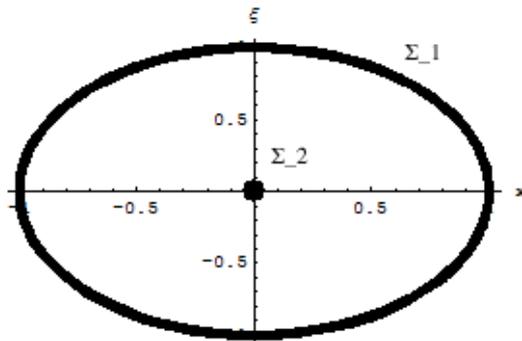


Figura 5.1: Possibili Σ_1 e Σ_2 nello spazio delle fasi.

$Op(q_1(E)\#(\tilde{p}_1 - E))\chi_0\phi_j = Op(\chi_0(\mathbf{x})(1 - \chi_1(\mathbf{x}, \xi)))\chi_0\phi_j$ è esponenzialmente piccolo, e siccome lo è anche $(1 - \chi_0)\phi_j$ segue il risultato per ϕ_j . Lo stesso ragionamento si può ripetere per $Op(\chi_0(\mathbf{x})(1 - \chi_2(\mathbf{x}, \xi)))\psi_k$. Dalla (5.7) scende così che

$$\|(1 - \chi_1(\mathbf{x}, \xi))\phi_j\|_{H^s} = \mathcal{O}(h^\infty), \quad (5.11)$$

$$\|(1 - \chi_2(\mathbf{x}, \xi))\psi_k\|_{H^s} = \mathcal{O}(h^\infty). \quad (5.12)$$

Per concludere la prova, introduciamo la nozione di insieme delle frequenze di un funzione. Data $\phi \in L^2$, si dice che un punto $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2n}$ non appartiene all'insieme delle frequenze di ϕ , e si scrive $(x_0, \xi_0) \notin FS(\phi)$, se esiste una funzione $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ tale che $\chi = 1$ intorno a (x_0, ξ_0) e $\|\chi(x, hD_x)\phi\| = \mathcal{O}(h^\infty)$. É noto che (cfr. [8], proposizione 2.9.4) in tale definizione la condizione ‘esiste una funzione $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ tale che $\chi = 1$ intorno a (x_0, ξ_0) ’ implica la condizione ‘per ogni funzione $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ con supporto in un intorno sufficientemente piccolo di (x_0, ξ_0) . Si dice anche che la funzione ϕ è microlocalmente $\mathcal{O}(h^\infty)$ attorno al punto (x_0, ξ_0) . Inoltre, se $(x_0, \xi_0) \notin FS(\phi)$ allora per ogni operatore pseudodifferenziale A $(x_0, \xi_0) \notin FS(A\phi)$, cioè gli operatori pseudodifferenziali non aumentano l'insieme delle frequenze di una funzione.

Dal risultato precedente segue immediatamente che

$$FS(A\phi_j) \subset FS(\phi_j) \subset \Sigma_1, \quad FS(A\psi_k) \subset FS(\psi_k) \subset \Sigma_2.$$

Ma, come possiamo osservare anche dalla figura (5.1), $\Sigma_1 \cap \Sigma_2 = \emptyset$, dunque $FS(A\phi_j) \cap FS(A\psi_k) = \emptyset$. Allora, ϕ_j e $A\phi_j$ ‘vivono microlocalmente’ su Σ_1 , e ψ_k e $A\psi_k$ su Σ_2 , e abbiamo

$$\begin{aligned} \phi_j &= \chi_1(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})\phi_j + \mathcal{O}(h^\infty), & \psi_k &= \chi_2(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})\psi_k + \mathcal{O}(h^\infty), \\ A_0\phi_j &= A_0\chi_1(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})\phi_j + \mathcal{O}(h^\infty), & A_0\psi_k &= A_0\chi_2(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})\psi_k + \mathcal{O}(h^\infty), \end{aligned}$$

per ogni $\chi_t \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ tale che $\chi_t = 1$ intorno a Σ_t . Ora, rimane

$$A_0\chi_1(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})\phi_j + \mathcal{O}(h^\infty) = \chi_1(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})A_0\phi_j + [A_0, \chi_1(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})]\phi_j + \mathcal{O}(h^\infty),$$

$$A_0\chi_2(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})\psi_k + \mathcal{O}(h^\infty) = \chi_2(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})A_0\psi_k + [A_0, \chi_2(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})]\psi_k + \mathcal{O}(h^\infty),$$

dove i simboli dei due commutatori si sviluppano in una serie a coefficienti con supporto in quello del gradiente di χ_1 e χ_2 rispettivamente. Ma $\text{Supp}\nabla\chi_t \cap \Sigma_t = \emptyset$, dunque

$$A_0\phi_j = \chi_1(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})A_0\phi_j + \mathcal{O}(h^\infty), \quad A_0\psi_k = \chi_2(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})A_0\psi_k + \mathcal{O}(h^\infty),$$

da cui, scrivendo χ_t per $\chi_t(\mathbf{x}, hD_{\mathbf{x}})$, segue finalmente che

$$\langle A_0\phi_j, \psi_k \rangle = \langle \chi_1 A_0\phi_j, \chi_2 \psi_k \rangle + \mathcal{O}(h^\infty) = \langle \chi_2 \chi_1 A_0\phi_j, \psi_k \rangle + \mathcal{O}(h^\infty) = \mathcal{O}(h^\infty),$$

$$\langle A_0\psi_k, \phi_j \rangle = \langle \chi_2 A_0\psi_k, \chi_1 \phi_j \rangle + \mathcal{O}(h^\infty) = \langle \chi_1 \chi_2 A_0\psi_k, \phi_j \rangle + \mathcal{O}(h^\infty) = \mathcal{O}(h^\infty).$$

□

Per completare la dimostrazione della proposizione è sufficiente osservare che la matrice

$$R_+ \tilde{P} R_- - \text{diag}(E_{1,1}, \dots, E_{1,l}, E_{2,1}, \dots, E_{2,m}) = \begin{pmatrix} 0 & (\langle A_0 \psi_k, \phi_j \rangle) \\ (\langle A_0^* \phi_j, \psi_k \rangle) & 0 \end{pmatrix}$$

ha dimensione $\mathcal{O}(h^{-n})$ e che il lemma appena dimostrato implica che essa abbia norma $\mathcal{O}(h^\infty)$ su \mathbb{C}^{l+m} uniformemente rispetto a n, m . La tesi segue quindi dalla (5.5). \square

Dal principio Min-Max e dalla proposizione precedente segue che, per $\lambda \in [m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]$, gli autovalori $g_1(\lambda), \dots, g_{l+m}(\lambda)$ di $Q(\lambda)$ sono tali che

- i. $\{g_1(\lambda), \dots, g_{l+m}(\lambda)\} \subset \{E_{1,1}, \dots, E_{1,l}, E_{2,1}, \dots, E_{2,m}\} + \mathcal{O}(h^2)$;
- ii. ad ogni $E \in \{E_{1,1}, \dots, E_{1,l}, E_{2,1}, \dots, E_{2,m}\} \cap [m_2 - \alpha + Ch^2, m_2 + \alpha - Ch^2]$, con $C \gg 1$, può essere associato un unico $\lambda \in [m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]$ tale che $\lambda \in Sp(Q(\lambda))$.

Infine, usando il fatto che, per costruzione, gli autovalori di \tilde{P} che giacciono in $[m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]$ coincidono con le soluzioni locali di $\lambda \in Sp(Q(\lambda))$, e ricordando i risultati dei capitoli precedenti, otteniamo finalmente il seguente

Teorema 5.4. *Per $0 < h \ll 1$ le risonance di P con parte reale in $[m_2 - \alpha, m_2 + \alpha]$ e parte immaginaria $\ll |h \ln h|$ coincidono, a meno di termini di errore dell'ordine di h^2 , con autovalori delle realizzazioni di Dirichlet di P_1 e P_2 su un aperto $B \subset \mathbb{R}^n$ che contiene il pozzo ed è contenuto nell'isola.*

Bibliografia

- [1] D. Benedetto, E. Caglioti, R. Libero, Non-trapping set and Huygens principle, ESAIM : Modélisation Mathématique et Analyse Numérique, 33 no. 3 (1999), p. 517-530.
- [2] M. Born, R. Oppenheimer, Zur Quantentheorie der Molekeln, Ann. Phys. 84 (1927), 457-484.
- [3] G. Dell'Antonio, Mathematical Aspects of Quantum Mechanics.
- [4] V. Grecchi, H. Kovařík, A. Martinez, A. Sacchetti, V. Sordoni, The Stark Effect on the H_2^+ -like Molecules, preprint.
- [5] B. Helffer, J. Sjöstrand, Multiple wells in the semiclassical limit I, Comm. Part. Diff. Eq. 9 (4) (1984) 337-408.
- [6] B. Helffer, J. Sjöstrand, Resonances en limite semi-classique, Ann. Inst. Henri Poincaré, section Physique Théorique, vol. 41, n. 3 (1984), 291-331.
- [7] B. Helffer, J. Sjöstrand, Puits multiples en limite-semiclassique. II. Interaction moléculaire. Symétries. Perturbation Ann. Inst. Henri Poincaré, section A, vol. 42, n. 2 (1985), 127-212.
- [8] A. Martinez, An introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis, Springer, 2002, New York.
- [9] A. Martinez, Développement asymptotiques ed effet tunnel dans l'approximation de Born-Oppenheimer, Ann. Inst. H. Poincaré 49 (1989), 239-257.
- [10] A. Martinez, Resonance Free Domains for Non Globally Analytic Potentials, Ann. Henri Poincaré 4 (2002) 739 - 756.
- [11] A. Martinez, V. Sordoni, Twisted Pseudodifferential Calculus and Application to the Quantum Evolution of Molecules, AMS, 2009, Providence (Rhode Island).

- [12] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, II volume, Elsevier, 1975, Amsterdam.
- [13] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, IV volume, Elsevier, 1978, Amsterdam.
- [14] H. C. Urey, The Structure of the Hydrogen Molecule Ion, 1925, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 11 (10): 618-21.
- [15] Wikipedia, the free encyclopedia.

Ringraziamenti

Devo riconoscere che i due anni trascorsi per ottenere la laurea specialistica in matematica sono stati particolarmente ricchi di stimoli.

Innanzitutto stimoli intellettuali, all'insegna di uno studio della matematica più profondo e consapevole. Di tale profondità e consapevolezza devo ringraziare innanzitutto i miei professori dell'Università di Bologna (ricordo Massimo Campanino, Bruno Franchi, Monica Idà, e in particolare Mirko degli Esposti) e di Durham (James Blowey, Michael Farber, Benjamin Dojon, e in particolare Brian Straughan), dove ho trascorso un indimenticabile anno di Erasmus. Una nota particolare va al professor André Georges Martinez, per la pazienza e lo scrupolo con cui mi ha seguito durante i mesi di redazione della tesi.

Poi stimoli politici e civili, per l'idea che una società più giusta e libera possa realizzarsi grazie all'impegno di tutti e tramite i partiti. Grazie ad Alfonso Alvisi, Paola Benati, Silvana Bettini, Thomas Casadei, Fabrizio Castellari, Paola Concia, Sonia Farina, Luca Foresti, Lucia Galli, Carla Govoni, Sandro Gozi, Emanuela Gnugnoli, Giorgio Laghi, Daniele Manca, Francesca Marchetti, Massimo Marchignoli, Ignazio Marino, Anna Pariani, Pierangelo Raffini, Fabio Rizzoli, Gabrio Salieri, Ivan Scalfarotto, Claudia Sermasi, Mario Zaccherini.

Poi stimoli umani, affettivi, per non dimenticare che in fondo siamo e restiamo 'solo' persone. La mia famiglia continua a farmi credere che, accada qualsiasi cosa, non tutto è perduto: grazie a mia madre Lorian, a mio padre Iader, a mio fratello Gregorio, a mia nonna Edda, a mio zio Enzo, a mia zia Paola. I miei amici mi aiutano anche quando, davvero, non gliene dò motivo: grazie ad Andrea, Carmen, Claudia, Davide, Federico, Federica, Giulia, Luca, Lucia, Marcello, Matteo, Sara, Silvia, Valentina, Vanna, Veronica. Un grazie particolare a Carlo.

Devo infine ringraziare chi ha creduto in me quando io ho smesso di credere ai miei sogni, e mi ha dato più coraggio di quanto probabilmente immagini: Nicola Arcozzi, Paolo Benincasa, Marco Manca, e ancora, e in particolare, mia madre Lorian.