

SÉMINAIRE ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES – ÉCOLE POLYTECHNIQUE

A. MARTINEZ

Sur l'approximation de Born-Oppenheimer des opérateurs d'onde

Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1994-1995), exp. n° 10,
p. 1-8

http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1994-1995____A10_0

© Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)
(École Polytechnique), 1994-1995, tous droits réservés.

L'accès aux archives du séminaire Équations aux dérivées partielles (<http://sedp.cedram.org>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

*CENTRE
DE
MATHEMATIQUES*

Unité de Recherche Associée D 0169

ECOLE POLYTECHNIQUE

F-91128 PALAISEAU Cedex (FRANCE)

Tél. (1) 69 33 40 91

Fax (1) 69 33 30 19 ; Tél. 601.596 F

Séminaire 1994-1995

EQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES

SUR L'APPROXIMATION DE BORN-OPPENHEIMER DES OPERATEURS D'ONDE

A. MARTINEZ

Sur l'approximation de Born-Oppenheimer des opérateurs d'onde

André MARTINEZ

*Université de Paris-Nord, Département de Mathématiques (CNRS, URA 742)
Av. J. B. Clément, F-93430 Villetaneuse, France*

1 - Introduction

Cet exposé décrit une partie des travaux [KMW1] et [KMW2] écrits en collaboration avec M. KLEIN et X.P. WANG, et où on s'intéresse au processus de diffusion des molécules diatomiques qui se scindent en deux ions. Pour étudier ce type de problème, une intuition physique assez répandue consiste à considérer que les noyaux sont suffisamment lourds relativement aux électrons, pour que l'action de ces derniers puisse être résumée en un potentiel (dit "effectif") dans lequel sont plongés les noyaux. Cette approximation trouve sa source dans l'article de Born et Oppenheimer [BoOp] (partiellement justifié dans [CDS], puis complètement dans [KMSW]) où seuls les états bornés des molécules sont envisagés, et qui a donné lieu à une très abondante littérature tant physique que mathématique (Cf. par exemple [AS], [BK], [CS], [Ha], [Ma], [S], ... pour ce qui concerne la littérature mathématique). Cependant, il semble que seule la littérature physique se soit intéressée à la validité de l'approximation de Born-Oppenheimer pour les états de diffusion (Cf. [Ch], [De], [WuOh]), et l'unique référence mathématique que nous ayons trouvée est le travail non publié de A. Raphaelian [Ra]. Bien que celui-ci ne comporte que des résultats qualitatifs, il a fortement motivé notre étude dont l'objectif est d'obtenir une estimation de l'erreur commise en fonction de la masse des noyaux.

2 - Description du problème

On considère un système de $N+2$ particules ($N \geq 1$) comportant 2 noyaux et N électrons, ainsi qu'une décomposition $C = \{C_1, C_2\}$ de ce système en deux amas dont chacun contient un noyau. Travaillant dans des coordonnées adaptées à cette décomposition, l'hamiltonien du système prend la forme (après suppression du mouvement du centre de masse) :

$$P = P(h) = -h^2 \Delta_x + P_e(x, h) \quad (1)$$

où h est un petit paramètre se comportant comme la racine carrée de la somme des inverses des masses des noyaux, $x \in \mathbf{R}^3$ désigne la position relative des centres de masse des amas, et $P_e(x, h)$ est ce qu'on appelle l'hamiltonien électronique : il se décompose lui-même sous la forme :

$$P_e(x, h) = P^c(h) + I_c(x, h) \quad (2)$$

où $P^c(h)$ (dont la dépendance par rapport à h n'est pas essentielle) est la somme des hamiltoniens internes à chaque amas, et $I_c(x, h)$ est un potentiel représentant toutes les interactions entre les deux amas.

Dans le cas d'un seul électron de masse 1 et de noyaux de masses égales à M (cas auquel on se restreindra souvent dans les explications données ici), on obtient en numérotant 1 et 2 les noyaux, 3 l'électron, et en prenant $C = \{(1), (2, 3)\}$:

$$\begin{aligned} h &= \left(\frac{2M+1}{2M(M+1)} \right)^{1/2} \\ P^c(h) &= -\frac{M+1}{M} \Delta_y + V_{23}(y) \\ I_c(x, h) &= V_{13}\left(x + \frac{1}{M+1}y - y\right) + V_{12}\left(x + \frac{1}{M+1}y\right) \end{aligned} \quad (3)$$

où $y \in \mathbf{R}^3$ représente la position relative de l'électron et du noyau $n^\circ 2$, et V_{ij} ($1 \leq i, j \leq 3$) est le potentiel d'interaction entre les particules $n^\circ i$ et $n^\circ j$.

Dans le cas général d'un nombre quelconque N d'électrons, $I_c(x, h)$ s'écrit comme une somme de fonctions de la forme $V(x + \ell(y, h), y)$ avec $y \in \mathbf{R}^{3N}$, et où $\ell(y, h)$ dépend linéairement de y avec des coefficients de l'ordre de h^2 . En fait, dans les coordonnées choisies, il s'avère que $x + \ell(y, h)$ représente la position relative des deux noyaux, et c'est précisément cette dépendance en h intervenant à l'intérieur des potentiels d'interaction qui pose le plus de problèmes pour notre étude.

Si l'on note

$$P_c = -h^2 \Delta_x + P^c(h)$$

alors on peut associer à la décomposition C l'opérateur d'onde (sous réserve d'existence) :

$$\Omega_\pm^c = s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itP} e^{-itP_c} E_{pp}(P^c) \quad (4)$$

où $E_{pp}(P^c)$ désigne le projecteur spectral de P^c associé à son spectre purement ponctuel. Cet opérateur décrit l'éventuelle évolution asymptotique d'un état de diffusion vers la somme directe de deux états bornés de chaque amas, se déplaçant librement l'un par rapport à l'autre. C'est lui qu'il s'agit d'essayer de décomposer, et si possible d'approcher par un opérateur d'onde "effectif" (ou "adiabatique") agissant dans la variable x uniquement.

3 - Résultat qualitatif

On numérote encore 1 et 2 les deux noyaux, 3, ..., $N+2$ les électrons, et on note V_{ij} le potentiel d'interaction entre les particules i et j dans l'hamiltonien quantique complet du système à $N+2$ corps. Afin de bien poser le problème, on commence par faire les hypothèses suivantes :

$$\begin{aligned} V_{ij} &\in C^\infty(\mathbf{R}^3 \setminus \{0\}) \\ \exists \rho > 1 \text{ tel que } \forall \alpha \in \mathbf{N}^3, \quad \partial^\alpha V_{ij}(x) &= \mathcal{O}(|x|^{-\rho-|\alpha|}) \quad (|x| \rightarrow \infty) \\ V_{ij} &\text{ est } \Delta - \text{compact sur } L^2(\mathbf{R}^3). \end{aligned} \quad (\text{H1})$$

Cette hypothèse assure notamment l'existence des opérateurs d'onde Ω_{\pm}^c définis en (4). On peut noter ici que les singularités coulombiennes sont autorisées, mais on a choisi de se limiter au cas de la courte portée à cause de la forme plus simple que prennent alors les opérateurs d'onde. Néanmoins, l'étude des opérateurs d'onde modifiés dans le cas de la longue portée devrait pouvoir se faire de manière similaire, et en particulier établir la validité de nos résultats dans la situation physique de potentiels purement coulombiens.

On note $\lambda_1(x, h) = \text{Inf } \sigma(P_e(x, h))$ et on se fixe un niveau d'énergie $\lambda_0 \in \mathbf{R}$. On suppose:

- (i) $\lambda_1(x, h) \in \sigma_{disc}(P_e(x, h))$ pour tout h assez petit, et pour x dans un voisinage \mathcal{V} de $\{\lambda_1(x, 0) \leq \lambda_0\}$;
- (ii) $\lambda_1(x, h) \rightarrow E_0(h)$ ($|x| \rightarrow +\infty$) uniformément par rapport à h assez petit, avec $E_0(h) < \lambda_0$, $E_0(h) \in \sigma_{disc}(P^c(h))$; (H2)
- (iii) $\exists \delta > 0$ tel que $\forall x \in \mathcal{V}$, $\forall h$ assez petit, $\text{dist}(\sigma(P_e(x, h)) \setminus \{\lambda_1(x, h)\}; \lambda_1(x, h)) \geq \delta$.

En fait, concernant l'hypothèse (ii), on peut montrer (cf. [KMW1]) que $P_e(x, h) \rightarrow P^c(h)$ ($|x| \rightarrow +\infty$) au sens fort de la résolvante, ce qui implique (cf. [Ka]) qu'il existe au moins une valeur propre de $P_e(x, h)$ qui tend vers $E_0(h)$. On demande ici que ce soit la première, ce qui, au moins dans le cas d'un seul électron, se révèle être une hypothèse sur la décomposition C choisie. On peut facilement s'en convaincre en considérant dans (3) le cas où $V_{23} = aV$, $V_{13} = bV$, $a \neq b$ (V étant un potentiel fixé formant un puits): à l'aide d'une étude de type "tight binding" (analogue à celle faite dans [Da]), on montre qu'alors $\lambda_1(x, h)$ tend vers $\text{Min}_{c \in \{a, b\}} \text{Inf } \sigma(-\frac{M+1}{M} \Delta_y + cV(y))$. L'hypothèse (ii) ne sera donc satisfaite ici que si l'on a fait le bon choix entre les décompositions $\{(1), (23)\}$ et $\{(2), (13)\}$. Ceci correspond également à l'intuition physique que lorsque les noyaux s'éloignent l'un de l'autre, l'électron aura tendance à suivre celui qui possède la plus grande charge électrique.

D'autre part, d'après les résultats de [CDS], si l'on note $\Pi_e(x, h)$ le projecteur spectral de $P_e(x, h)$ associé à $\lambda_1(x, h)$, l'hypothèse (iii) assure que $\Pi_e(x, h)$ dépend de manière C^2 de x sur \mathcal{V} . A l'aide d'une partition de l'unité, on peut alors prolonger $\Pi_e(x, h)$ de manière régulière pour x en dehors de \mathcal{V} , de telle sorte que le prolongement (que l'on continue de noter $\Pi_e(x, h)$) vérifie : $\Pi_e(x, h)P_e(x, h)\Pi_e(x, h) \geq \lambda_0 + \varepsilon$ pour x en dehors de \mathcal{V} , avec $\varepsilon > 0$. On définit alors l'hamiltonien "adiabatique" par :

$$P^{AD} = \Pi_e(h)P(h)\Pi_e(h)$$

où $\Pi_e(h)$ est le projecteur induit par l'action de $\Pi_e(x, h)$ sur $L^2(\mathbf{R}^{3(N+1)})$. Si l'on note également $\Pi^c(h)$ le projecteur spectral de $P^c(h)$ associé à $E_0(h)$, on a alors le premier résultat suivant (essentiellement dû à Raphaelian [Ra]) :

THEOREME 1 . – Sous les hypothèses (H1) et (H2) les deux opérateurs d'onde suivants existent :

$$\begin{aligned}\Omega_{\pm}^{AD} &= s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itP^{AD}} e^{-itP_c} \Pi^c \\ \Omega_{\pm}^{NAD} &= s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itP} e^{-itP^{AD}} E_{ac}(P^{AD})\end{aligned}$$

(où E_{ac} désigne le projecteur spectral associé au spectre absolument continu). De plus, on a l'identité :

$$\Omega_{\pm}^c \Pi^c = \Omega_{\pm}^{NAD} \Omega_{\pm}^{AD}.$$

Ainsi, l'évolution asymptotique associée à la décomposition C se décompose en une évolution adiabatique décrite par Ω_{\pm}^{AD} , et une évolution non adiabatique décrite par Ω_{\pm}^{NAD} . Afin de savoir dans quelle mesure l'évolution non adiabatique peut être négligée lorsque h tend vers zéro, on a besoin de rajouter plusieurs hypothèses dont certaines peuvent apparaître comme purement techniques, mais d'autres correspondent tout à fait aux conditions physiques intuitivement nécessaires pour qu'une telle approximation soit possible.

4 - Résultat quantitatif

En plus des hypothèses (H1) et (H2), on suppose maintenant :

$$\begin{aligned}\text{(i)} \quad \forall \alpha \in \mathbf{N}^3, \quad \partial^\alpha V_{ij}(x) &= \mathcal{O}\left(\frac{1 + |V_{ij}(x)|}{|x|^{|\alpha|}}\right) \quad (x \rightarrow 0) \\ \text{(ii)} \quad V_{12}(x) &\underset{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{a_0}{|x|} \quad \text{avec } a_0 > 0, \quad \text{et } \partial^\alpha(|x|V_{12}) \in L_{\text{loc}}^\infty \text{ pour } |\alpha| \leq 2.\end{aligned}\tag{H3}$$

Remarquons que (H3) est satisfaite par les potentiels physiques. La première partie de cette hypothèse est technique, et son intérêt est de nous permettre d'utiliser les procédés de régularisation en x introduits dans [KMSW]. La seconde partie est plus difficile à expliquer : d'un point de vue technique, elle permet de ne pas avoir de pertes dépendant de h dans les estimations, notamment du fait de l'apparition de h^2 dans l'argument de V_{12} . Plus précisément, elle entraîne l'existence d'une constante $a > 0$ telle que $\| -\Delta_y u + V_{12}(x + \ell(y, h))u \| \geq a(\|\Delta u\| + \|V_{12}(x + \ell(y, h))u\|)$ uniformément par rapport à u , x , et h . La seule hypothèse (H1) donnerait quant à elle une perte en $h^{-2}\|u\|$. Dans la mesure où c'est seulement cette estimation qui nous est utile (éventuellement même modulo des pertes en $\mathcal{O}(\|u\|)$), on peut bien sûr remplacer la partie (ii) de (H3) par des conditions de régularité en 0 de V_{12} . Mais ces conditions ne correspondant pas au cas physique, on préfère énoncer le résultat avec (H3).

On suppose en outre :

$$\lambda_1(x, h) \rightarrow \lambda_1(x, 0) \quad (h \rightarrow 0_+) \quad \text{localement uniformément par rapport à } x \in \mathcal{V} \tag{H4}$$

Cette hypothèse est en fait automatiquement satisfaite lorsque $N = 1$. Dans les autres cas, on peut montrer qu'elle est équivalente à l'existence de $\varepsilon > 0$ tel que la première

fonction propre normalisée $\varphi_1(x, y, h)$ de $P_e(x, h)$ vérifie : $\|e^{\varepsilon\langle y \rangle} \varphi_1(x, y, h)\|_{L^2(\mathbf{R}_y^{3N})} = \mathcal{O}(1)$ uniformément par rapport à h (et localement uniformément par rapport à x). En utilisant les techniques d'Agmon [Ag], on voit que cette dernière estimation est vraie si l'on remplace \mathbf{R}_y^{3N} par le complémentaire d'un compact K_h de \mathbf{R}_y^{3N} assez grand, mais nous n'avons pas réussi à montrer que ce compact pouvait être choisi indépendant de h .

Pour $x \in \mathcal{V}$, notons maintenant $p(x, \xi) = \xi^2 + \lambda_1(x, 0)$, et $H_p = 2\xi\partial_x - (\partial_x \lambda_1(x, 0))\partial_\xi$ le champ hamiltonien associé. On suppose que le flot de H_p est non captif à l'énergie λ_0 , c'est à dire :

$$\forall(x, \xi) \in p^{-1}(\lambda_0), \quad |\text{expt}H_p(x, \xi)| \rightarrow \infty \text{ lorsque } t \rightarrow \pm\infty. \quad (\text{H5})$$

On a alors :

THEOREME 2 . – *Sous les hypothèses (H1)-(H5), soit $\chi \in C_0^\infty(\mathbf{R})$ à support dans un voisinage assez petit de λ_0 . Alors :*

$$\begin{aligned} \|(\Omega_\pm^{NAD} - 1)\chi(P^{AD})\| &= \mathcal{O}(h) \\ \|(\Omega_\pm^c - \Omega_\pm^{AD})\chi(P_c)\| &= \mathcal{O}(h) \end{aligned}$$

uniformément par rapport à $h > 0$ assez petit.

Remarque : On peut difficilement faire beaucoup mieux que $\mathcal{O}(h)$, car même pour l'étude des états bornés de P , le spectre de P^{AD} n'approche celui de P que modulo $\mathcal{O}(h^2)$. De plus, la correction à apporter alors à P^{AD} dépend de manière non linéaire de l'énergie, dans le sens qu'il existe un opérateur $Q(\lambda)$ dépendant de manière non linéaire de λ tel que : $\lambda \in \sigma(P) \iff 0 \in \sigma(\lambda - P^{AD} - Q(\lambda))$. Il semble donc assez ardu (quoique pas forcément impossible) d'inclure une telle correction dans le cadre de l'étude des opérateurs d'onde.

5 - Idée des preuves

Pour le théorème 1, on se contente de montrer que pour tout h et pour $|\alpha| \leq 2$, on a l'estimation :

$$\|\partial_x^\alpha (\Pi_e(x, h) - \Pi^c(h))\| = \mathcal{O}(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho})$$

uniformément par rapport à x de norme assez grande. Cette estimation se montre en écrivant $\Pi_e(x, h)$ et $\Pi^c(h)$ sous forme d'intégrales de résolvantes, et en utilisant la décroissance exponentielle à l'infini des fonctions propres de $P_e(x, h)$ et de $P^c(h)$. L'existence des opérateurs d'onde Ω_\pm^{AD} et Ω_\pm^{NAD} en découle ensuite facilement par la méthode de Cook.

Pour le théorème 2, on a en plus besoin d'uniformité par rapport à h , et on montre en fait :

$$\|e^{\varepsilon\langle y \rangle} \partial_x^\alpha (\Pi_e(x, h) - \Pi^c(h))\| = \mathcal{O}(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho})$$

avec $\varepsilon > 0$, uniformément par rapport à x et h , et pour $|\alpha| \leq 2$. Ensuite, l'estimation-clé est :

LEMME . – Pour tout $s > 1/2$, et $z \in \mathbf{C} \setminus \mathbf{R}$ assez proche de λ_0 , on a :

$$\|\langle x + \ell(y, h) \rangle^{-s} (P - z)^{-1} \langle x + \ell(y, h) \rangle^{-s} = \mathcal{O}(h^{-1})$$

uniformément par rapport à $h > 0$ assez petit.

Pour montrer ce lemme, on effectue le changement de variable $x' = x + \ell(y, h)$, qui transforme P en $P_1 = -h^2 \Delta_{x'} + P_e(x', 0) + hB(hD_{x'}, D_y)$. En posant ensuite un problème de Grushin adapté à la situation, on obtient quatre opérateurs $E(z)$, $E^-(z)$, $E^+(z)$, $E^{-+}(z)$ tels que :

$$(P_1 - z)^{-1} = E(z) - E^+(z) (E^{-+}(z))^{-1} E^-(z)$$

où $E^{-+}(z)$ n'agit que dans la variable x' . De plus, par les techniques de régularisation de [KMSW], on voit que $E^{-+}(z) = z + h^2 \Delta_{x'} - \lambda_1(x', 0) - hb(x', hD_{x'}) + h^2 T(z, h)$ où $b(x', hD_{x'})$ est un opérateur différentiel d'ordre 1 à coefficients régulier en dehors de 0, et $\|\langle x' \rangle^s T(z, h) \langle x' \rangle^s\| = \mathcal{O}(1)$ uniformément. En utilisant le fait que $\lambda_1(x', 0) \rightarrow +\infty$ lorsque $x' \rightarrow 0$, on montre ensuite que les calculs symbolique et fonctionnel des opérateurs h -admissibles (Cf. [HeRo]) peuvent se généraliser à des opérateurs tels que $-h^2 \Delta_{x'} + \lambda_1(x', 0) + hb(x', hD_{x'})$. En particulier, l'hypothèse de non capture permet comme dans [MaGe] d'obtenir par la théorie de Mourre [Mo] l'estimation :

$$\|\langle x' \rangle^{-s} (E^{-+}(z))^{-1} \langle x' \rangle^{-s}\| = \mathcal{O}(h^{-1}),$$

d'où le lemme découle assez facilement.

On déduit du lemme une estimation analogue pour la résolvante réduite :

$$\|\langle x + \ell(y, h) \rangle^{-s} (P^{AD} - z)^{-1} \langle x + \ell(y, h) \rangle^{-s} = \mathcal{O}(h^{-1})$$

ce qui signifie que l'opérateur $\langle x + \ell(y, h) \rangle^{-s}$ est P^{AD} - et P -régulier près de λ_0 . La théorie des opérateurs H -réguliers (cf. [ReSi]) permet d'en déduire de manière standard que l'on a :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\langle x + \ell(y, h) \rangle^{-s} e^{itH} \chi(H) f\|^2 dt = \mathcal{O}(h^{-1} \|f\|^2) \quad (5)$$

où $H \in \{P, P^{AD}\}$, et $\chi \in C_0^\infty$ est à support près de λ_0 .

Pour finir, on écrit la formule :

$$(\Omega_+^{NAD} - 1) \chi(P^{AD}) = i \int_0^{+\infty} e^{itP} (P - P^{AD}) e^{-itP^{AD}} \chi(P^{AD}) dt \quad (6)$$

et on utilise le fait que si $\tilde{\chi}$ est une autre troncature en énergie vérifiant $\tilde{\chi}\chi = \chi$, on a :

$$\begin{aligned} \|\tilde{\chi}(P) - \tilde{\chi}(P^{AD})\| &= \mathcal{O}(h) \\ \Omega_+^{NAD} \tilde{\chi}(P^{AD}) &= \tilde{\chi}(P) \Omega_+^{NAD} \\ \|\tilde{\chi}(P) \langle x + \ell(y, h) \rangle^{\rho/2} (P - P^{AD}) \langle x + \ell(y, h) \rangle^{\rho/2} \chi(P^{AD})\| &= \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

ce qui à l'aide de (5) et (6) permet de conclure (le cas de Ω_-^{NAD} se traitant de manière similaire).

Références

[Ag] S.Agmon : *Lectures on exponential decay of solutions of second-order elliptic equations*, Princeton University Press 1982

[AS] P.Aventini, R.Seiler : *On the electronic spectrum of the diatomic molecule*, Comm. Math. Phys. 22, 269-279 (1971)

[BK] A.Balazard-Konlein : *Calcul fonctionnel pour des opérateurs h -admissibles à symbole opérateurs et applications*, Thèse 3ème cycle, Université de Nantes (1985)

[BoOp] M.Born, R.Oppenheimer : *Zur Quantentheorie der Molekeln*, Ann. Physik 84, 457 (1927)

[CDS] J.M.Combes, P.Duclos, R.Seiler : *The Born-Oppenheimer approximation*, Rigorous Atomic and Molecular Physics, A.S.Wightman and A.Velo eds, New York : Plenum 1981

[Ch] M.S.Child : *Semiclassical methods in molecular scattering and spectroscopy*, Proc. of NATO conf., D.Reidel (1980)

[CS] J.M.Combes, R.Seiler : *Regularity and asymptotic properties of the discrete spectrum of electronic Hamiltonians*, Int. J. Quant. Chem. XIV, 213-229 (1978)

[Da] JF.Daumer : *Equation de Schrödinger avec champ électrique périodique et champ magnétique constant dans l'approximation du tight-binding*, Comm. Part. Diff. Eq. 18 (5-6), 1021-1041 (1993)

[De] J.B.Delos : *Theory of electronic transitions in slow atomic collisions*, Rev. Mod. Phys. 53, 287-358 (1981)

[HeRo] B.Helffer, D.Robert : *Calcul fonctionnel par la transformation de Mellin et opérateurs admissibles*, J. Funct. An. 53 (3), 246-268 (1983)

[Ha] G.A.Hagedorn : *High order corrections to the time-independent Born-Oppenheimer approximation*, Ann. Inst. H. Poincaré 47, 1-16 (1987)

[Ka] T.Kato : *Perturbation theory for linear operators*, Springer 1976

[KMSW] M.Klein, A.Martinez, R. Seiler, X.P.Wang : *On the Born-Oppenheimer expansion for polyatomic molecules*, Comm. Math. Phys. 143, 606-639 (1992)

[KMW1] M.Klein, A.Martinez, X.P.Wang : *On the Born-Oppenheimer approximation of wave operators in molecular scattering theory*, Comm. Math. Phys. 152, 73-95 (1993)

[KMW2] M.Klein, A.Martinez, X.P.Wang : *On the Born-Oppenheimer approximation of*

wave operators II : singular potentials, en préparation

[Ma] A.Martinez : *Développements asymptotiques et effet tunnel dans l'approximation de Born-Oppenheimer*, Ann. Inst. H. Poincaré 49, 239-257 (1989)

[MaGe] A.Martinez, C.Gérard : *Principe d'absorption limite pour des opérateurs de Schrödinger à longue portée*, C. R. Acad. Sci. Paris 906, I, 121-123 (1988)

[Mo] E.Mourre : *Absence of singular continuous spectrum for certain self-adjoint operators*, Comm. Math. Phys. 78, 391-408 (1981)

[Ra] A.Raphaelian : *Ion-atom scattering within a Born-Oppenheimer framework*, Dissertation T.U. Berlin (1986)

[S] R.Seiler : *Does the Born-Oppenheimer approximation work ?*, Helv. Phys. Acta 46, 230-234 (1973)

[WuOh] T.Y.Wu, T.Ohmura : *Quantum theory of scattering*, Prentice-Hall 1962