Centre de Mathématiques Laurent Schwartz
Ecole Polytechnique

SEMINAIRE

Equations aux Dérivées Partielles

2001-2002

Clotilde Fermanian Kammerer and Patrick Gérard

Une formule de Landau-Zener pour un croisement générique de codimension 2

Séminaire É. D. P. (2001-2002), Exposé n° XX, 14 p.

<http://sedp.cedram.org/item?id=SEDP_2001-2002____A20_0>

U.M.R. 7640 du C.N.R.S.
F-91128 PALAISEAU CEDEX
Fax : 33 (0)1 69 33 49 49
Tél : 33 (0)1 69 33 49 99

cedram
Article mis en ligne dans le cadre du
Centre de diffusion des revues académiques de mathématiques
http://www.cedram.org/

Une formule de Landau-Zener pour un croisement générique de codimension 2

Clotilde FERMANIAN KAMMERER
Université de Cergy-Pontoise
Patrick GERARD
Université Paris 11

Introduction

On étudie le comportement de familles de solutions d'un système d'équations aux dérivées partielles,

$$ih\partial_t\psi^h = \mathrm{op}_h(P)\psi^h,$$

où $\mathrm{op}_h(P)$ désigne l'opérateur pseudodifférentiel semi-classique ayant comme symbole de Weyl la matrice hermitienne $P = P(t, x, \xi)$. Dès que les valeurs propres de l'hamiltonien P ne sont pas de multiplicité constante, on est confronté au problème des croisements de mode. Il se passe alors un phénomène de transfert d'énergie entre les modes que l'on quantifie par des formules dites de Landau-Zener en référence aux auteurs qui, les premiers, mirent en lumière ce phénomène, cf. [11] et [14]. Il faut ensuite citer les travaux d'Hagedorn [7], pour des états cohérents ainsi que ceux de d'Hagedorn, Joye ([6], [8], [10]) et de Colin de Verdière – Lombardi – Pollet ([1]) pour des croisements évités. Enfin, dans [3], nous avons utilisé les mesures semi-classiques pour décrire le transfert d'énergie sur un modèle particulier de croisement. Nous conservons ici la même approche mais pour une classe de croisements bien plus large.

Habituellement, on classifie les symboles suivant la codimension de l'ensemble où les valeurs propres coïncident. Nous nous intéressons ici à des croisements de codimension 2 avec des valeurs propres de multiplicité minimale, ce qui nous conduit à considérer des hamiltoniens qui sont des matrices 2×2. Nous supposons de plus que cet hamiltonien est réel et auto-adjoint, il s'écrit donc

$$P = k + \begin{pmatrix} p_1 & p_2 \\ p_2 & -p_1 \end{pmatrix},$$

où $k = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(P)$ est une fonction scalaire.

Nous allons commencer par expliquer plus précisément ce phénomène sur l'exemple le plus simple de matrice symétrique 2×2 présentant un croisement de modes, puis nous montrerons comment un croisement générique – dans un sens que nous préciserons – présente la même géométrie que le cas modèle. Nous établirons des formules de Landau-Zener pour ces croisements et expliquerons comment ces formules s'obtiennent par un théorème de réduction qui renvoie à l'étude d'un système peu différent de celui du cas modèle.

1 Le système de Landau et Zener

1.1 La matrice symétrique de trace nulle présentant un croisement de codimension 2 la plus simple est

$$M(s,z) = \begin{pmatrix} s & z \\ z & -s \end{pmatrix}, \quad (s,z) \in \mathbb{R}^2.$$

Ses valeurs propres sont $\pm\sqrt{s^2+z^2}$, les projecteurs spectraux associés sont

$$\Pi^{\pm} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} \pm \frac{1}{\sqrt{s^2+z^2}} M(s,z)\right),$$

le croisement a lieu en $\{s=0,\ z=0\}$. On notera que lorsque $z=0$, les projecteurs $\Pi^{\pm}$ vérifient

$$\Pi^+ = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } s>0 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \text{si } s<0 \end{cases}, \quad \Pi^- = \begin{cases} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \text{si } s>0 \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } s<0 \end{cases} \tag{1}$$

On s'intéresse au système d'équations différentielles ordinaires

$$\frac{h}{i}\partial_s u^h = M(s,z) u^h. \tag{2}$$

Ce système, qu'étudièrent Landau et Zener dans leurs premiers travaux, est suffisamment simple pour que des calculs explicites puissent être faits. On obtient la proposition suivante dont on peut trouver une preuve dans [3].

Proposition 1 . *Soit (u^h) une famille uniformément bornée dans $L^\infty(\mathbb{R}_s, L^2(\mathbb{R}_z))$ satisfaisant à (2), il existe des familles (α_1^h,α_2^h) et (ω_1^h,ω_2^h) uniformément bornées dans $L^2(\mathbb{R}_z)$ telles que lorsque h tend vers 0,*

si $s<0$, $u^h(s,z) = \mathrm{e}^{i\frac{s^2}{2h}} \mid \frac{s}{\sqrt{h}} \mid^{i\frac{z^2}{2h}} \begin{pmatrix} \alpha_1^h(z) \\ 0 \end{pmatrix} + \mathrm{e}^{-i\frac{s^2}{2h}} \mid \frac{s}{\sqrt{h}} \mid^{-i\frac{z^2}{2h}} \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_2^h(z) \end{pmatrix} + o(1),$

si $s>0$, $u^h(s,z) = \mathrm{e}^{i\frac{s^2}{2h}} \mid \frac{s}{\sqrt{h}} \mid^{i\frac{z^2}{2h}} \begin{pmatrix} \omega_1^h(z) \\ 0 \end{pmatrix} + \mathrm{e}^{-i\frac{s^2}{2h}} \mid \frac{s}{\sqrt{h}} \mid^{-i\frac{z^2}{2h}} \begin{pmatrix} 0 \\ \omega_2^h(z) \end{pmatrix} + o(1).$

De plus

$$\begin{pmatrix} \omega_1^h(z) \\ \omega_2^h(z) \end{pmatrix} = S\left(\frac{z}{\sqrt{h}}\right) \begin{pmatrix} \alpha_1^h(z) \\ \alpha_2^h(z) \end{pmatrix} \tag{3}$$

où $S(\eta) = \begin{pmatrix} a(\eta) & -\overline{b}(\eta) \\ b(\eta) & a(\eta) \end{pmatrix}$, *avec* $a(\eta) = \mathrm{e}^{-\frac{\pi\eta^2}{2}}$ *et* $\mid b(\eta) \mid^2 + a(\eta)^2 = 1.$

Compte tenu de (1), les termes en α_1^h et ω_2^h sont liés à la décomposition de u^h sur le mode $-$ et les termes en α_2^h et ω_1^h à celle sur le mode $+$. Le coefficient de couplage entre les modes est donc donné par $a(\frac{z}{\sqrt{h}})$ qui tend vers 0 en dehors de $\{z=0\}$. Il est en effet bien connu qu'en dehors du croisement, il n'y a pas de couplage entre les modes au premier ordre lorsque h tend vers 0 (cf. par exemple [5] et [13]). De plus, il apparaît que le couplage entre les modes au dessus de $z=0$ dépend de la façon dont se concentre (u^h) à l'échelle $\sqrt{h}$ au-dessus de $z=0$. Pour décrire ce couplage en énergie, nous allons utiliser les mesures semi-classiques à deux échelles. Celles-ci ont été introduites par L. Miller dans sa thèse et étudiées dans [3]. Pour les définir, nous allons nous placer pour un moment dans un cadre plus général.

1.2 Les mesures semi-classiques à 2 **échelles.** Soit $I=\{f_1=\ldots=f_p=0\}$ une sous-variété involutive de $T^*\mathbb{R}^d$ de codimension p. On caractérise le fibré normal à I, $N(I)$, par sa fibre au-dessus d'un point ρ de I, à savoir $T(T^*\mathbb{R}^d)_{|\rho}/TI_{|\rho}$, le quotient du tangent à l'espace tout entier par le tangent à I. En rajoutant à cette fibre un point à l'infini dans toutes les directions, on obtient le fibré normal à I compactifié que l'on note $\overline{N}(I)$.

Les symboles que nous allons considérer sont des fonctions a dépendant des variables $(x,\xi,\eta)\in\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^p$, $\mathcal{C}^\infty$ dans ces variables et vérifiant les deux hypothèses suivantes :

- il existe un compact $K\subset\mathbb{R}^d_x\times\mathbb{R}^d_\xi$ tel que pour tout $\eta\in\mathbb{R}^p$, la fonction $a(.,.,\eta)$ est à support compact dans K,

- il existe une fonction homogène de degré 0 dans la variable η, $a_\infty=a_\infty(x,\xi,\eta)$, il existe $R\in\mathbb{R}^{*+}$ tel que si $|\,\eta\,|>R$, $a(x,\xi,\eta)=a_\infty(x,\xi,\eta)$ pour tout $(x,\xi)\in\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d$. On note $a(x,\xi,\frac{\eta}{|\eta|}\infty)=\lim_{R\to+\infty}a_\infty(x,\xi,R\,\eta)$.

Remarquons que le choix d'une équation de I, $f=0$, induit un système de coordonnées sur $\overline{N}(I)_{|\rho}$, pour $\rho\in I$, donné par l'extension naturelle $\overline{\chi}$ de l'isomorphisme

$$\begin{aligned}\chi\ :\ N(I)&\to\mathbb{R}^p,\\ [\delta\rho]&\mapsto\eta=df(\rho)\delta\rho.\end{aligned}$$

Si ν est une mesure sur $\overline{N}(I)$, on notera ν_f la mesure sur $\overline{\mathbb{R}^p}$, image par $\overline{\chi}$ de ν.

Soit (v^h) une famille uniformément bornée de $L^2(\mathbb{R}^d,\mathbf{C}^N)$, sa concentration sur I à l'échelle $\sqrt{h}$ est alors décrite par le théorème suivant.

Théorème 1 . *Il existe une mesure de Radon positive matricielle ν sur $\overline{N}(I)$, il existe une suite h_k, $h_k\underset{k\to+\infty}{\longrightarrow}0$, telles que pour toute matrice a dont les coefficients sont des fonctions de $\mathcal{A}$,*

$$\left(\mathrm{op}_{h_k}\left(a\left(x,\xi,\frac{f(x,\xi)}{\sqrt{h_k}}\right)\right)v^{h_k}\ \mid\ v^{h_k}\right)\underset{k\to+\infty}{\longrightarrow}\mathrm{Tr}<a\ ,\ \nu_f>$$
$$+\mathrm{Tr}\left(\int_{T^*\mathbb{R}^d\setminus I}a\left(x,\xi,\frac{f(x,\xi)}{|\,f(x,\xi)\,|}\infty\right)d\mu(x,\xi)\right),$$

où μ est une mesure semi-classique de la suite v^{h_k}.

On remarque que, connaissant une mesure à deux échelles ν, toute mesure semi-classique μ pour la même sous-suite est déterminée au-dessus de I par la formule

$$\mathbf{1}_I \mu(x,\xi) = \int_{\mathbb{R}^p} \nu(x,\xi,d\eta).$$

Lorsque (v^h) est solution d'une équation aux dérivées partielles $\mathrm{op}_h(p)v^h = o(h)$, on retrouve les propriétés usuelles de localisation et de propagation des mesures semi-classiques. Appelons $\Sigma = \{p = 0\}$ la variété caractéristique et supposons que I coupe transversalement Σ. La mesure à deux échelles ν_I associée à (v^h) et I est supportée au-dessus de Σ. De plus, si on suppose que $\Sigma \cap I$ est involutive, il est naturel de considérer la mesure $\nu_{\Sigma\cap I}$ associée à (v^h) et $\Sigma \cap I$. La mesure $\nu_{\Sigma\cap I}$ est supportée dans le fibré $T\Sigma/T(\Sigma\cap I)$ compactifié, que nous noterons $\overline{N}_\Sigma(\Sigma\cap I)$ et est propagée par le linéarisé transversalement à Σ du flot hamiltonien associé à p. De plus, on peut identifier ν_I et $\nu_{\Sigma\cap I}$. Cette identification – qui est prouvée dans [3] – nous sera utile dans la suite.

1.3. Formules de Landau-Zener pour les mesures à deux échelles. Revenons à la famille u^h solution de (2), et considérons la mesure à deux échelles ν associée à la concentration de (u^h) sur $\{z = 0\}$ à l'échelle $\sqrt{h}$. Lorsque $s < 0$, on a

$$\nu(s,\sigma,z,\zeta) = \delta(\sigma - s)\,\nu^{-,p}(z,\zeta)\,\Pi^- + \delta(\sigma + s)\,\nu^{+,p}(z,\zeta)\,\Pi^+,$$

où $\nu^{-,p}$ est la mesure à deux échelles de (α_1^h) et $\nu^{+,p}$ celle de (α_2^h). Par ailleurs, pour $s > 0$,

$$\nu(s,\sigma,z,\zeta) = \delta(\sigma - s)\,\nu^{+,f}(z,\zeta)\Pi^+ + \delta(\sigma + s)\,\nu^{-,f}(z,\zeta)\Pi^-,$$

où $\nu^{-,f}$ est la mesure à deux échelles de (ω_2^h) et $\nu^{+,f}$ celle de (ω_1^h). Du fait de l'équation (3), si $\nu^{+,p}$ et $\nu^{-,p}$ sont étrangères sur $\{|\ \eta\ | < +\infty\}$, le branchement des mesures à deux échelles au-dessus de $\{s = \sigma = 0\}$ obéit à la loi

$$\begin{pmatrix}\nu^{+,f}\\ \nu^{-,f}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 - T(\eta) & T(\eta)\\ T(\eta) & 1 - T(\eta)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\nu^{+,p}\\ \nu^{-,p}\end{pmatrix},$$

avec $T(\eta) = a(\eta)^2 = \mathrm{e}^{-\pi\eta^2}$.

Notons que la mesure ν est localisée au-dessus de $J = \{\sigma + s = 0,\ z = 0\}$ et de $J' = \{\sigma - s = 0,\ z = 0\}$. Ces deux ensembles sont des sous-espaces involutifs de $T^*\mathbb{R}^2_{s,z}$ constitués des courbes hamiltoniennes de $\sigma \pm \sqrt{s^2 + z^2}$ passant par $\{s = \sigma = z = 0\}$. Par ailleurs, $J \cup J'$ est l'intersection de la variété caractéristique $\Sigma = \{s^2 + z^2 = \sigma^2\}$ et de l'espace vectoriel involutif $I = \{z = 0\}$. Il est donc équivalent de considérer la mesure ν ou les mesures ν_J et $\nu_{J'}$ associées à la concentration de (u^h) sur J et J'. En particulier, en-dehors de $s = \sigma = 0$, ν est propagée le long des trajectoires hamiltoniennes de $\sigma \pm \sqrt{s^2 + z^2}$. Dans ce qui suit, nous allons montrer comment ces propriétés géométriques sont conservées pour une large classe d'hamiltoniens, ce qui donne lieu à des formules de Landau-Zener du même type.

2 Croisements génériques de codimension 2

Soit (ψ^h) une famille de solutions de

$$\begin{cases} ih\partial_t\psi^h = \mathrm{op}_h(k)\psi^h + \mathrm{op}_h\begin{pmatrix} p_1 & p_2 \\ p_2 & -p_1 \end{pmatrix}\psi^h, \\ \psi^h_{|t=0} = \psi^h_0, \end{cases} \tag{4}$$

with $\mid \psi^h_0 \mid_{L^2(I\!R^d)} < C$, $k = k(t,x,\xi) \in \mathcal{C}^\infty(I\!R^{2d+1})$, $p = p(t,x,\xi) \in \mathcal{C}^\infty(I\!R^{2d+1}, I\!R^2)$. Les valeurs propres de l'hamiltonien considéré sont $\lambda^\pm = \tau + k \pm \mid p \mid$ et les projecteurs spectraux $\Pi^\pm = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} \pm \frac{1}{|p|}\begin{pmatrix} p_1 & p_2 \\ p_2 & -p_1 \end{pmatrix}\right)$. Le croisement a lieu sur $\{p = 0\}$ et on note

$$S = \{p = 0,\ (\tau + k)^2 = \mid p \mid^2\}.$$

2.1 Hypothèses. On suppose que le croisement est de *codimension* 2 c'est-à-dire que la propriété suivante est vérifiée

$$\forall t \in I\!R,\ \ (x,\xi) \mapsto p(t,x,\xi)\ \ est\ \ de\ \ rang\ \ 2\ \ sur\ \ \{p = 0\}. \tag{$H1$}$$

Soit $E = \{\tau + k, p\}$, $b = \{p_1, p_2\}$. Nous démontrerons dans la suite que si $\mid E \mid^2 < b^2$, aucune courbe hamiltonienne de $\lambda^\pm$ ne rencontre l'ensemble S. Le problème de croisement de modes ne se rencontre que si $\mid E \mid^2 \geq b^2$. On dira que le croisement est *générique* si

$$\mid E \mid^2 > b^2. \tag{$H2$}$$

Sous cette hypothèse, nous montrerons l'existence et l'unicité des courbes hamiltoniennes de $\lambda^\pm$ passant par un point donné de S. Remarquons que le cas $\mid E \mid^2 = b^2$ recouvre des situations plus variées, en particulier – par exemple si $p = x$ et $k = \mid \xi \mid^2$ en un point où $x = \xi = 0$ – il peut exister plusieurs trajectoires passant en un point de S pour le même mode.

Exemples: **1)** Un premier exemple est donné par l'équation de Schrödinger avec potentiel matriciel (cf.[7]). Dans ce contexte, un modèle type de croisement de codimension 2 correspond au choix de

$$k = \frac{\mid \xi \mid^2}{2},\ \ p = p(x),\ \ (x,\xi) \in I\!R^2 \times I\!R^2 \tag{5}$$

dans (4), avec par exemple $p(x) = 0$ si et seulement si $x = 0$ et $dp(0)$ inversible. Dans ce cas, l'hypothèse de généricité est satisfaite en dehors de $\{\xi = 0\}$.

2) Un autre exemple est donné par un système de type Dirac obtenu en prenant

$$k(t,x,\xi) = V(t,x),\ \ p(t,x,\xi) = \xi - A(t,x),\ \ (x,\xi) \in I\!R^2 \times I\!R^2.$$

Le vecteur E est alors le champ électrique et $\mid b \mid$ la norme du champ électromagnétique. Le modèle traité dans [3] correspond à $V(t,x) = V(x)$ et $A(t,x) = 0$.

2.2 La géométrie du croisement.

Proposition 2 . *Soit $\rho_0 = (t_0, x_0, \tau_0, \xi_0) \in S$ tel que les hypothèses (H1) et (H2) soient vérifiées en ρ_0. Il existe deux courbes $\rho_s^\pm$ telles que*

$$\dot{\rho}_s^\pm = H_{\lambda^\pm}(\rho_s^\pm),$$
$$\rho_s^\pm \mid_{s=0} = \rho_0.$$

De plus, la courbe $(\rho_s^\pm)_{s\leq 0}$ se prolonge de façon $\mathcal{C}^\infty$ par $(\rho_s^\mp)_{s\geq 0}$. Il existe donc deux champs H et H' linéairement indépendants et transverses à S tels que

$$\lim_{s\to 0^-} H_{\lambda^+}(\rho_s^+) = \lim_{s\to 0^+} H_{\lambda^-}(\rho_s^-) = H,$$
$$\lim_{s\to 0^+} H_{\lambda^+}(\rho_s^+) = \lim_{s\to 0^-} H_{\lambda^-}(\rho_s^-) = H'.$$

Preuve : Remarquons que s'il existe de telles courbes,

$$\rho_s^\pm = (t_0 + s, x_s^\pm, \tau_s^\pm, \xi_s^\pm),$$

nécessairement, il existe $r, r' \geq 0$ et $\omega, \omega' \in \mathbf{S}^1$ tels que

$$\frac{1}{s} p(t_0 + s, x_s^\pm, \xi_s^\pm) \underset{s\to 0^\pm}{\longrightarrow} r\omega, \quad \frac{1}{s} p(t_0 + s, x_s^\mp, \xi_s^\mp) \underset{s\to 0^\pm}{\longrightarrow} r'\omega'.$$

On doit donc avoir

$$r\omega = E + b\,\omega^\perp, \quad r'\omega' = E + b\,(\omega')^\perp.$$

(pour $x = (x_1, x_2) \in I\!R^2$, on note $x^\perp = (-x_2, x_1)$.) On remarque que sous l'hypothèse (H2), il existe une unique solution à ces deux équations, avec $r = r' > 0$ et que l'on a alors

$$H = H_{\tau+k} + \omega_1 H_{p_1} + \omega_2 H_{p_2}, \tag{6}$$
$$H' = H_{\tau+k} - \omega'_1 H_{p_1} - \omega'_2 H_{p_2}. \tag{7}$$

Par ailleurs, si $\mid b \mid < \mid E \mid$, il n'existe pas de solutions et donc aucune trajectoire classique n'atteint S.

Notons $\tilde{\rho}_s = \rho_s^+$ si $s < 0$ et $\tilde{\rho}_s = \rho_s^-$ si $s > 0$, $\tilde{\rho}_s = \left(\tilde{x}_s, \tilde{\xi}_s\right)$, et posons $g = \frac{1}{s} p(t_0 + s, \tilde{x}_s, \tilde{\xi}_s)$ de sorte que $\frac{p}{|p|} = \mathrm{sgn}(s) \frac{g}{|g|}$. Les fonctions $(\tilde{x}_s, \tilde{\xi}_s, g)$ vérifient le système

$$\frac{d}{ds}\tilde{x}_s = \nabla_\xi k(t_0 + s, \tilde{x}_s, \tilde{\xi}_s) + {}^t\nabla_\xi p \,\frac{g}{\mid g \mid},$$
$$\frac{d}{ds}\tilde{\xi}_s = -\nabla_x k(t_0 + s, \tilde{x}_s, \tilde{\xi}_s) - {}^t\nabla_x p \,\frac{g}{\mid g \mid},$$
$$\frac{d}{ds}(sg) = E(t_0 + s, \tilde{x}_s, \tilde{\xi}_s) + b(t_0 + s, \tilde{x}_s, \tilde{\xi}_s)\frac{g^\perp}{\mid g \mid}.$$

En introduisant le vecteur ω dans cette dernière équation et en posant $g(s) = r\omega + y(s)$, on peut la réécrire sous la forme

$$s\frac{d}{ds}y+(1-Q_0)y = F(s,\tilde{x}_s,\tilde{\xi}_s)+\Big(b(t_0+s,\tilde{x}_s,\tilde{\xi}_s)-b(t_0,x_0,\xi_0)\Big)\,G(y)y+b(0,x_0,\xi_0)H(y)y\cdot y,$$

où Q_0 est la matrice définie par $Q_0 y = \frac{1}{r}b(t_0,x_0,\xi_0)\,(y-(\omega\cdot y)\omega)^{\perp}$, F, G et H sont des fonctions régulières avec $F(0,x_0,\xi_0)=0$. Le système sur $(y,\tilde{x}_s,\tilde{\xi}_s)$ est alors de la forme

$$s\frac{d}{ds}y + (1-Q_0)y = A(s,\tilde{x}_s,\tilde{\xi}_s,y(s)), \tag{8}$$

$$\frac{d}{ds}\tilde{x}_s = B_1(s,\tilde{x}_s,\tilde{\xi}_s,y(s)), \tag{9}$$

$$\frac{d}{ds}\tilde{\xi}_s = B_2(s,\tilde{x}_s,\tilde{\xi}_s,y(s)), \tag{10}$$

où A, B_1 et B_2 désignent les seconds membres explicités ci-dessus.

La matrice Q_0 est une matrice nilpotente, la fonction $s \mapsto s\,\mathrm{e}^{-Q_0 \ln|s|}$ est donc une fonction absolument continue et l'équation (8) s'écrit

$$\frac{d}{ds}\left(s\,\mathrm{e}^{-Q_0\ln|s|}y\right) = \mathrm{e}^{-Q_0\ln|s|}A(s,\tilde{x}_s,\tilde{\xi}_s,y(s)).$$

En intégrant cette équation entre 0 et s et en faisant le changement de variable $\sigma = s\theta$, on obtient

$$\begin{aligned} s\,\mathrm{e}^{-Q_0\ln|s|}y(s) &= \int_0^s \mathrm{e}^{-Q_0\ln|\sigma|}A(\sigma,\tilde{x}_\sigma,\tilde{\xi}_\sigma,y(\sigma))d\sigma \\ \text{soit}\;\; y(s) &= \int_0^1 \mathrm{e}^{-Q_0\ln\theta}A(s\theta,\tilde{x}_{s\theta},\tilde{\xi}_{s\theta},y(s\theta))d\theta. \end{aligned}$$

On s'intéresse alors à l'application

$$\begin{aligned} \mathcal{F} : \Big(\tilde{x}_s,\tilde{\xi}_s,y(s)\Big) \mapsto \Big(\int_0^1 &\mathrm{e}^{-Q_0\ln\theta}A(s\theta,\tilde{x}_{s\theta},\tilde{\xi}_{s\theta},y(s\theta))d\theta, \\ &x_0+\int_0^s B_1(\sigma,\tilde{x}_\sigma,\tilde{\xi}_\sigma,y(\sigma))d\sigma\,,\; \xi_0+\int_0^s B_2(\sigma,\tilde{x}_\sigma,\tilde{\xi}_\sigma,y(\sigma))d\sigma\Big), \end{aligned}$$

et on considère l'ensemble $\mathcal{B}_{\delta,s_0}$ défini pour δ, $s_0 > 0$ par

$$\mathcal{B}_{\delta,s_0} = \left\{ \operatorname*{Sup}_{|s|<s_0}\Big(|\,\tilde{x}_s-x_0\,|+|\,\tilde{\xi}_s-\xi_0\,|+|\,y(s)\,|\Big) < \delta,\;\; y(0)=0,\;\; \tilde{x}_0 = x_0,\;\; \tilde{\xi}_0=\xi_0 \right\}.$$

Compte tenu de la forme particulière de A, l'application $\mathcal{F}$ est bien définie sur $\mathcal{B}_{s_0,\delta}$. De plus, pour s_0 et δ suffisamment petits, $\mathcal{F}$ est une contraction de l'ensemble $\mathcal{B}_{s_0,\delta}$ sur lui-même. Son point fixe nous donne la solution cherchée. Un argument similaire permet de construire les courbes $(\rho_s^+)_{s>0}$ et $(\rho_s^-)_{s<0}$. $\diamondsuit$

Considérons un voisinage Ω de ρ_0 tel que les hypothèses (H1) et (H2) soient vérifiées dans Ω. On peut alors définir les ensembles $J^{\pm,p}$ constitués des parties des courbes $(\rho_s^{\pm})_{s<0}$ incluses dans Ω et arrivant en un point de $S \cap \Omega$, et les ensembles $J^{\pm,f}$ constitués des parties des courbes $(\rho_s^{\pm})_{s>0}$, incluses dans Ω et issues d'un point de $S \cap \Omega$. Du fait de la proposition 2, $J^{+,p}$ et $J^{-,f}$ d'une part et $J^{+,f}$ et $J^{-,p}$ d'autre part se recollent de façon $\mathcal{C}^\infty$ au-dessus de S en

$$J = J^{+,p} \cup J^{-,f}, \quad J' = J^{+,f} \cup J^{-,p}.$$

Proposition 3 . *Les ensembles J et J' sont des sous variétés involutives de codimension 2 de $T^*I\!R^{d+1}_{t,x}$ pour la forme symplectique $\sigma = d\tau \wedge dt + d\xi \wedge dx$.*

Preuve: Comme J et J' sont tissées à partir de S qui est de codimension 3, il est clair que J et J' sont de codimension 2. Par ailleurs, le flot servant à les construire étant hamiltonien, il suffit de vérifier l'involutivité de l'espace tangent à J et J' au-dessus d'un point de S. Soit $\rho \in S$, on a alors

$$TJ_{|\rho} = TS_{|\rho} \oplus I\!RH,$$

donc $(TJ_{|\rho})^\perp = TS_{|\rho}^\perp \cap H^\perp$. Notons $V = TS_{|\rho}^\perp$, l'espace vectoriel V est engendrée par $H_{\tau+k}$, H_{p_1} et H_{p_2}. En particulier, d'après (6), $H \in V$ et en utilisant (H2), $H \notin \mathrm{Ker}(\sigma_{|V})$, où $\sigma_{|V}$ désigne la restriction de σ à V. Le noyau de $\sigma_{|V}$ est donc de dimension 1 et par considération de dimension, on obtient

$$H^\perp \cap V = \mathrm{Ker}(\sigma_{|V}) \oplus I\!R H \subset V^\perp \oplus I\!R H.$$

On a donc obtenu $(TJ_{|\rho})^\perp \subset TS_{|\rho} \oplus I\!R H$ et donc l'involutivité de J. On raisonne de même pour J'.$\diamondsuit$

Remarque. Pour un croisement de codimension 3, c'est-à-dire pour un hamiltonien de la forme

$$P(t,x,\xi) = k(t,x,\xi) + \begin{pmatrix} p_1 & p_2 + ip_3 \\ p_2 - ip_3 & p_1 \end{pmatrix},$$

tel que l'ensemble $\{p = 0\}$ soit de codimension 3, la situation géométrique peut-être très différente. Notons $E = \{\tau + k, p\}$ et $B = (\{p_2, p_3\}, \{p_3, p_1\}, \{p_1, p_2\})$. La condition

$$E \cdot B \neq 0 \ \text{ ou } \ (E \cdot B = 0, \ \mid E \mid > \mid B \mid)$$

suffit à assurer l'existence des trajectoires classiques mais, dans le cas $E \cdot B \neq 0$, les ensembles J et J' ne sont pas des sous-variétés involutives. Un exemple de ce type est étudié dans [2].

2.4. Formules de Landau-Zener. Soient ν (resp. ν') les mesures à deux échelles associées à (ψ^h) et J (resp. J'). Soient

$$j^{\pm,p} = J^{\pm,p} \backslash S, \quad j^{\pm,f} = J^{\pm,f} \backslash S,$$
$$\Sigma^\pm = \{\lambda^\pm = 0\}.$$

En utilisant la propriété de localisation des mesures à deux échelles, on obtient l'existence de quatre mesures $\nu^{\pm,p}$ sur $N_{\Sigma^\pm}(\dot{J}^{\pm,p})$ et $\nu^{\pm,f}$ sur $N_{\Sigma^\pm}(\dot{J}^{\pm,f})$ telles que

$$\nu = \begin{cases} \nu^{+,p}\ \Pi^+ \text{ au}-\text{dessus de } \dot{J}^{+,p} \\ \nu^{-,f}\ \Pi^- \text{ au}-\text{dessus de } \dot{J}^{-,f} \end{cases}, \quad \nu' = \begin{cases} \nu^{+,f}\ \Pi^+ \text{ au}-\text{dessus de } \dot{J}^{+,f} \\ \nu^{-,p}\ \Pi^- \text{ au}-\text{dessus de } \dot{J}^{-,p} \end{cases}.$$

De plus ces mesures sont propagées par les flots induits par $H_{\lambda^\pm}$ sur $N_{\Sigma^\pm}(\dot{J}^{\pm,p})$ et $N_{\Sigma^\pm}(\dot{J}^{\pm,f})$ suivant les cas. Comme H et H' sont transverses à S, ces mesures ont des traces au-dessus de S que nous noterons $\nu_S^{\pm,p}$ et $\nu_S^{\pm,f}$. En regardant la limite des fibres de $N_{\Sigma^\pm}(\dot{J}^{\pm,p})$ et de $N_{\Sigma^\pm}(\dot{J}^{\pm,f})$ au-dessus d'un point ρ tendant vers un point ρ_0 de S, on remarque que $\nu_S^{+,p}$ et $\nu_S^{-,f}$ sont des mesures sur $H^\perp/TJ$ tandis que $\nu_S^{-,p}$ et $\nu_S^{+,f}$ sont des mesures au-dessus de $(H')^\perp/TJ'$. Ces deux derniers fibrés peuvent être identifiés au fibré de rang 1

$$D := T(T^*I\!R^d)/P\mid_S \quad \text{où} \quad P := TS \oplus I\!RH \oplus I\!RH'.$$

On vérifie que $P^\perp$ est engendré par

$$W_0 = bH_{\tau+k} - E_2 H_{p_1} + E_1 H_{p_2},$$

l'application

$$\begin{aligned} D &\to I\!R \\ [\rho] &\mapsto \sigma(W_0, \rho) \end{aligned}$$

donne donc un système de coordonnées sur D. Le lien entre $\nu_S^{\pm,f}$ et $\nu_S^{\pm,p}$ est décrit par le théorème suivant.

Théorème 2 . *Si les mesures $\nu_S^{+,p}$ et $\nu_S^{-,p}$ sont étrangères sur D, alors*

$$\begin{pmatrix} \nu_S^{+,f} \\ \nu_S^{-,f} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-T & T \\ T & 1-T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_S^{+,p} \\ \nu_S^{-,p} \end{pmatrix},$$

avec

$$T([\delta\rho]) = \exp\left(-\pi \frac{(\sigma(\delta\rho, W_0))^2}{(\mid E\mid^2 - b^2)^{3/2}} \right).$$

De plus

$$\nu^{\pm,f}([\delta\rho]\infty) = \nu^{\pm,p}([\delta\rho]\infty). \tag{11}$$

Remarque. Le théorème ci-dessus est un résultat local et l'hypothèse sur les mesures incidentes peut paraître extrêmement restrictive puisqu'il semble, qu'en général, après le premier croisement, elle ne puisse plus être vérifiée. Cependant, dans de nombreux cas physiques, il n'en est rien et ce résultat local suffit pour établir un résultat global car, comme nous l'a fait remarquer A. Joye, les trajectoires associées à l'un des modes et issues d'un point du croisement n'y reviennent pas. C'est le cas pour un croisement du type de (5) lorsque $x \mapsto\mid p(x)\mid^2$ est une fonction convexe ; le cas $p(x) = x$ est étudié dans [4].

3 Un théorème de réduction

Les formules de Landau-Zener que nous avons décrites dans la section précédente sont la conséquence d'un théorème de réduction qui ramène l'étude du système (4) à celle d'un système proche du système de Landau et Zener. Nous rappelons que si κ est une transformation canonique de $T^*\mathbb{R}^d$, il existe un opérateur intégral de Fourier U tel que

$$\forall a \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d), \ \ \forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \ \ U^*\mathrm{op}_h(a)Uf = \mathrm{op}_h(a \circ \kappa)f + O(h^2).$$

On trouve une preuve de ce fait dans [3]. Nous appellerons un tel opérateur *opérateur intégral de Fourier associé à* κ.

Théorème 3 . *Soit* $\rho_0 \in S$ *tel que (H1) et (H2) soient vérifiées en* ρ_0, *il existe un voisinage* Ω *de* ρ_0 *et une transformation canonique locale* κ *de* Ω *dans un voisinage* Ω' *de* 0

$$\kappa : \ (t, x, \tau, \xi) \mapsto (s, \sigma, z, \zeta),$$

il existe un opérateur intégral de Fourier U *associé à* κ *et un opérateur pseudodifférentiel matriciel* B *tels que la famille* $u^h = UB\psi^h$ *vérifie que pour tout* $\phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega')$

$$\mathrm{op}_h(\phi)\,\mathrm{op}_h \begin{pmatrix} -\sigma + s & \gamma z_1 \\ \gamma z_1 & -\sigma - s \end{pmatrix} u^h = h\,\mathrm{op}_h(R)u^h + o(h), \tag{12}$$

où $\gamma = \gamma(s, \sigma, z, \zeta)$ *est une fonction à valeurs réelles ne s'annulant pas sur l'ensemble* Ω' *et* $R = R(s, \sigma, z, \zeta)$ *est une matrice de la forme*

$$R = hS + \zeta_1 R_1 + sR_2,$$

avec S *symétrique. De plus*

$$\begin{aligned} J \cup J' &= \{\sigma^2 - s^2\} \cap \{z_1 = 0\}, \\ J^{\pm,f} &= \{s > 0, \ -\sigma \pm s = 0, \ \ z_1 = 0\}, \\ J^{\pm,p} &= \{s < 0, \ -\sigma \mp s = 0, \ \ z_1 = 0\}. \end{aligned}$$

Le système (12) est à rapprocher du système (2).

Ce théorème permet de démontrer les formules de Landau-Zener par la même méthode que celle employée dans [3] pour le cas particulier d'un hamiltonien donné par $k = V(x)$ et $p = \xi$. On commence par établir une estimation d'énergie qui permet de voir le système (12) comme une équation d'évolution malgré la dépendance de γ en la variable σ. On montre ensuite la réflexion des mesures à deux échelles à l'infini en démontrant directement les équations (11) dans les nouvelles variables (s, σ, z, ζ). Enfin, pour établir les formules de Landau-Zener proprement dites, on utilise une méthode de forme normale qui permet de geler la fonction γ sur sa valeur au-dessus de S et d'utiliser directement la Proposition 1.

4 Aperçu de la preuve du théorème de réduction

La preuve du théorème de réduction se fait en trois étapes. La première étape consiste à faire apparaître les équations de J et J' dans l'hamiltonien par un simple calcul matriciel. Dans la deuxième étape, on choisit les nouvelles coordonnées temporelles s et σ. Enfin, dans un troisième temps, on utilise l'involutivité de J et J' pour exhiber une variable z_1 satisfaisante et conclure.

4.1 Calcul matriciel. Cette première étape s'inspire de [2]. On commence par expliciter des équations de J et J'. Remarquons qu'il existe une fonction $y = y(t, x, \tau, \xi) \in \mathbb{R}^{2d-1}$ telle que

$$(t, \tau, x, \xi) \mapsto (\tau + k, p, y)$$

soit un difféomorphisme local dans un voisinage d'un point ρ_0 de S. Du fait de l'hypothèse (H2), l'application

$$\begin{aligned} J &\to \mathbb{R}^{2d} \\ \rho &\mapsto (\tau + k, y) \end{aligned}$$

est de rang $2d$. On peut donc trouver des équations de J de la forme $p = \theta(\tau + k, y)$. Comme $\mid p \mid = \mid \tau + k \mid$ sur J, il existe un vecteur normé u dépendant régulièrement des variables (t, x, τ, ξ) tel que

$$J = \{p(t, x, \xi) = (\tau + k(t, x, \xi))\, u(t, x, \tau, \xi)\}.$$

On construit de même $u' = u'(t, x, \tau, \xi')$ tel que

$$J' = \{p(t, x, \xi) = (\tau + k(t, x, \xi))\, u'(t, x, \xi)\}.$$

De ce fait, si

$$I = \{(p - (\tau + k)u) \cdot (u - u')^{\perp} = 0\},$$

on a $J \cup J' = \Sigma \cap I$. On note

$$e_1 = \frac{u - u'}{\mid u - u' \mid}, \quad e_2 = e_1^{\perp}, \quad f = (p - (\tau + k)u) \cdot e_2, \quad \theta = u \cdot e_2,$$

on remarque que $(u - u')_{|S} = -\frac{E}{|E|}$ et que $\mid \theta \mid < 1$. On démontre alors le lemme suivant.

Lemme 1 . *Il existe une matrice $Q = Q(t, x, \tau, \xi)$ telle que*

$$Q\left(\tau + k + \begin{pmatrix} p_1 & p_2 \\ p_2 & -p_1 \end{pmatrix}\right) Q^* = \tau + k + \alpha\, f + \begin{pmatrix} \beta\, p \cdot e_1 & \gamma\, f \\ \gamma\, f & -\beta\, p \cdot e_1 \end{pmatrix} := P_1,$$

où

$$\alpha = -\frac{\theta}{1 - \theta^2}, \quad \beta = \frac{1}{\sqrt{1 - \theta^2}}, \quad \gamma = \frac{1}{1 - \theta^2},$$

sont des fonctions à valeurs réelles des variables (t, x, τ, ξ').

Après quantification des opérateurs, on est amené à étudier le système

$$ih\partial_t \phi^h = \mathrm{op}_h(P_1)\phi^h + h\,\mathrm{op}_h(S_1)\phi^h + o(h),$$

où S_1 est une matrice symétrique et $\phi^h = B\psi^h$ pour un choix convenable de B.

4.2 Choix des coordonnées temporelles. Compte-tenu de la valeur de e_1 au-dessus d'un point de S, on remarque alors que

$$\{\tau + k + \alpha f\ ,\ \beta p \cdot e_1\}_{|S} = -\frac{|\,E\,|}{(1-\theta^2)^{3/2}}\left(1 - \frac{b^2}{|\,E\,|^2}\right) < 0.$$

Le lemme 21.3.4 de [9] nous assure de l'existence d'une fonction λ strictement positive sur un voisinage de ρ_0 (que nous noterons Ω) et telle que les fonctions

$$\sigma = -\lambda\,(\tau + k + \alpha f)\,,\quad s = \lambda(\beta\, p \cdot e_1),$$

vérifient $\{\sigma, s\} = 1$.

Par le théorème de Darboux on complète (σ, s) en un système de coordonnées symplectiques locales $(s, \sigma, \tilde z, \tilde\zeta)$ près de ρ_0. En utilisant un opérateur intégral de Fourier $\tilde U$ associé à la transformation canonique $\tilde\kappa : (t, x, \tau, \xi) \mapsto (s, \sigma, \tilde z, \tilde\zeta)$. la famille $\tilde u^h = \tilde U \phi^h$ satisfait localement à

$$\mathrm{op}_h \begin{pmatrix} -\sigma + s & \tilde f \\ \tilde f & -\sigma - s \end{pmatrix} \tilde u^h = h\,\mathrm{op}_h(S_2) u^h + o(h),$$

où S_2 est une matrice symétrique et

$$\tilde f(s, \sigma, \tilde z, \tilde\zeta) = \lambda\,\gamma\, f(t, x, \tau, \xi).$$

Par ailleurs, on vérifie que

$$J = \{\tilde f = 0,\ \ \sigma + s = 0\},\ \ J' = \{\tilde f = 0,\ \ \sigma - s = 0\}.$$

4.3. Choix des coordonnées spatiales. On utilise le fait que J et J' sont des sous-variétés involutives de $T^*\mathbb{R}^d$ pour obtenir des propriétés de $\tilde f$. En effet, l'involutivité de J et J' implique que

$$\{\sigma + s\ ,\ \tilde f\} = 0 \ \text{ sur } \ \tilde f = 0,\ \ \sigma + s = 0,$$
$$\{\sigma - s\ ,\ \tilde f\} = 0 \ \text{ sur } \ \tilde f = 0,\ \ \sigma - s = 0.$$

Ces relations permettent de démontrer le lemme suivant.

Lemme 2 . *Il existe deux fonctions μ et χ telles que*

$$\tilde f(s, \sigma, \tilde z, \tilde\zeta) = \mu(s, \sigma, \tilde z, \tilde\zeta)\tilde f(0, 0, \tilde z, \tilde\zeta) + (\sigma^2 - s^2)\chi(s, \sigma, \tilde z, \tilde\zeta).$$

On choisit alors la coordonnée $z_1 = \tilde{f}(0,0,\tilde{z},\tilde{\zeta})$ que l'on complète en un système de coordonnées symplectiques (s,σ,z,ζ). On est alors amené, après utilisation d'un nouvel opérateur intégral de Fourier, à étudier un système de la forme

$$\mathrm{op}_h \begin{pmatrix} -\sigma + s & \mu z_1 + (\sigma^2 - s^2)\chi \\ \mu z_1 + (\sigma^2 - s^2)\chi & -\sigma - s \end{pmatrix} u^h = h\, \mathrm{op}_h(S_3) u^h + o(h),$$

avec S_3 symétrique. En utilisant que $\sigma^2 - s^2 = (\sigma - s)(\sigma + s)$ et en réinjectant la deuxième équation dans la première et réciproquement, on montre que ce système est équivalent à un système du type de (12). Ceci achève la preuve du théorème de réduction.

References

[1] Y. Colin de Verdière, M. Lombardi, J. Pollet: The microlocal Landau-Zener formula. *Ann. Inst. Henri Poincaré*, **71**, N^{o}1, (1999), p.95-127.

[2] C. Fermanian Kammerer : A non commutative Landau-Zener formula. *Prépublication de l'Université Cergy-Pontoise*, N^0 1, (2002)

[3] C. Fermanian Kammerer, P.Gérard : Mesures semi-classiques et croisements de modes. Prépublications de l'Université Paris 11 (2000) A paraître au Bull. S.M.F.

[4] C. Fermanian Kammerer, C. Lasser : Wigner measures and codimension 2 crossings. Preprint, N^0 44, Analysis, Modeling and Simulation for Multiscale Problems, *Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschunqsqemeinschaft.*

[5] P. Gérard, P. A. Markowich, N. J. Mauser, F. Poupaud: Homogenization Limits and Wigner Transforms. *Comm. Pure Appl. Math.*, **50**, (1997), 4, p.323-379.

[6] G. A. Hagedorn: Proof of the Landau-Zener formula in an adiabatic limit with small eigenvalue gaps. *Commun. Math. Phys.* **136**, (1991), p. 433-449.

[7] G. A. Hagedorn: Molecular Propagation through Electron Energy Level Crossings. *Memoirs of the A. M. S.*, **111**, N^o 536, (1994).

[8] G. A. Hagedorn, A. Joye: Landau-Zener transitions through small electronic eigenvalue gaps in the Born-Oppenheimer approximation. *Ann. Inst. Henri Poincaré*, **68**, N^{o}1, (1998), p.85-134.

[9] L. Hörmander: The analysis of linear Partial Differential Operators III. *Springer-Verlag*, (1985).

[10] A. Joye: Proof of the Landau-Zener formula. *Asymptotic Analysis* **9**, (1994), p.209-258.

[11] L. Landau: *Collected papers of L. Landau*, Pergamon Press, (1965).

[12] L. Miller: Propagation d'onde semi-classiques à travers une interface et mesures 2-microlocales. *Thèse de l'Ecole Polytechnique*, (1996).

[13] H. Spohn, S. Teufel: Adiabatic decoupling and time-dependent Born-Oppenheimer theory, *Commun. Math. Phys.* **224**, (2001), pp. 113-132.

[14] C. Zener: Non-adiabatic crossing of energy levels, *Proc. Roy. Soc. Lond.* **137**, (1932), p.696-702.