



Centre de
Mathématiques
Laurent Schwartz

X ECOLE
POLYTECHNIQUE

SEMINAIRE

**Equations aux
Dérivées
Partielles**

1999-2000

Clotilde Fermanian-Kammerer et Patrick Gérard

Mesures semi-classiques et croisement de modes

Séminaire É. D. P. (1999-2000), Exposé n° XVII, 13 p.

<http://sedp.cedram.org/item?id=SEDP_1999-2000____A17_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/>

Mesures semi-classiques et croisement de modes

Clotilde FERMANIAN KAMMERER

Université de Cergy-Pontoise

Patrick GERARD

Université Paris 11

21 mars 2000

1 Introduction

La dynamique semi-classique d'électrons dans un cristal a fait l'objet de plusieurs travaux récents (voir par exemple [4], [6], [15], [17]). Dans le cas d'un cristal multidimensionnel, l'analyse de ce problème se heurte au fait désormais bien connu que le hamiltonien classique possède des valeurs propres de multiplicité variable (voir par exemple [3]), de sorte que les modes peuvent éventuellement interagir. C'est ce type de difficulté que nous nous proposons de résoudre ici dans un cas simple.

Fixons d'abord les notations. Pour tout $\xi = (\xi_1, \xi_2) \in \mathbb{R}^2$, la matrice

$$A(\xi) = \begin{pmatrix} \xi_1 & \xi_2 \\ \xi_2 & -\xi_1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

a, pour tout $\xi \neq 0$, deux valeurs propres distinctes, qui dégènèrent en une valeur propre double pour $\xi = 0$. Soit $V : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe C^∞ . Alors, pour tout réel $h > 0$, l'opérateur différentiel

$$H^h = A(hD_x) + V(x) \quad (2)$$

est essentiellement autoadjoint sur l'espace $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^2, \mathbf{C}^2)$. Pour toute famille (ψ_0^h) bornée dans \mathcal{H} quand h tend vers 0, on se propose d'étudier le comportement, quand h tend vers 0, de la solution $\psi^h \in \mathcal{C}(\mathbb{R}, \mathcal{H})$ du système

$$ih\partial_t \psi^h = H^h \psi^h, \quad \psi^h(0) = \psi_0^h. \quad (3)$$

Dans le cas particulier où $\psi_0^h(x)$ a une expression explicite de type état cohérent, une formule approchée pour ψ^h a été établie en détail dans les travaux de Hagedorn [7] et Hagedorn-Joye [8]. Ici, nous souhaitons obtenir des informations pour des familles (ψ_0^h) générales, satisfaisant seulement à la condition suivante, dite de h -oscillation dans [5],

$$\int_{h|\xi| \geq R} |\hat{\psi}_0^h(\xi)|^2 d\xi \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0, \quad (4)$$

qui correspond intuitivement au fait que les fréquences de Fourier de ψ_0^h ne dépassent pas l'ordre de $1/h$.

Dans ce contexte, il est naturel de chercher à déterminer l'évolution des mesures semi-classiques $\mu = \mu(t, x, \tau, \xi)$ de la famille (ψ^h) , définies comme les valeurs d'adhérence dans

$\mathcal{S}'(\mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^2 \times \mathbb{R}_\tau \times \mathbb{R}_\xi^2)$, quand h tend vers 0, des transformées de Wigner de ψ^h ,

$$W^h \psi^h(t, x, \tau, \xi) = \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}^2} e^{i(s\tau + y \cdot \xi)} \psi^h(t - h\frac{s}{2}, x - h\frac{y}{2}) \otimes \overline{\psi^h}(t + h\frac{s}{2}, x + h\frac{y}{2}) \frac{dy ds}{(2\pi)^3}, \quad (5)$$

qui sont des mesures positives à valeurs dans les matrices 2×2 hermitiennes (voir par exemple [5], [6], [12]), et décrivent, dans l'espace des phases, la localisation et la polarisation des particules classiques.

En dehors de $\{\xi = 0\}$, le système (3) est à caractéristiques simples, et les résultats de [6] permettent d'obtenir la formule

$$\mu = \mu^+ \Pi^+ + \mu^- \Pi^-, \quad (6)$$

où les Π^\pm sont les projecteurs associés à $A(\xi)$,

$$\Pi^\pm(\xi) = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{A(\xi)}{|\xi|} \right) \quad (7)$$

tandis que μ^\pm sont des mesures positives scalaires satisfaisant aux équations de transport

$$\partial_t \mu^\pm \pm \frac{\xi}{|\xi|} \cdot \nabla_x \mu^\pm - \nabla V(x) \cdot \nabla_\xi \mu^\pm = 0, \quad (8)$$

et aux conditions initiales

$$\mu^\pm(0, x, \tau, \xi) = \text{tr}(\Pi^\pm \mu_0) \delta(\tau \pm |\xi| + V(x)), \quad (9)$$

μ_0 désignant une mesure semi-classique de la famille (ψ_0^h) .

Ainsi, si la mesure μ_0 ne charge pas le lieu singulier $\{\xi = 0\}$, la mesure μ est entièrement déterminée par μ_0 tant que les courbes caractéristiques des équations (8) – c'est-à-dire les trajectoires classiques – issues du support de μ_0 n'atteignent pas $\{\xi = 0\}$. L'objectif de ce travail est de décrire μ près de $\{\xi = 0\}$ sans cette dernière restriction.

1.1 Un premier résultat.

Le résultat suivant montre que les particules atteignant le lieu singulier $\{\xi = 0\}$ en un point x non critique pour le potentiel V , ne peuvent rester sur ce lieu singulier.

Proposition 1 *Soit μ une mesure semi-classique d'une famille de solutions (ψ^h) du système (3), alors*

$$\mu(\{\xi = 0, \nabla V(x) \neq 0\}) = 0. \quad (10)$$

Corollaire 1 *Avec les notations de la proposition (1), la formule (6) a lieu dans tout le domaine $\Omega = \{\xi = 0, \nabla V(x) \neq 0\}$.*

La proposition 1 repose sur une équation sur μ que l'on établit en introduisant l'opérateur Γ défini par

$$\begin{aligned} \Gamma &= \left(\frac{\hbar}{i} \partial_t + V(x) - A(\hbar D_x) \right) \circ \left(\frac{\hbar}{i} \partial_t + V(x) + A(\hbar D_x) \right) \\ &= \left(\frac{\hbar}{i} \partial_t + V(x) \right)^2 + \hbar^2 \Delta + [V(x), A(\hbar D_x)]. \end{aligned}$$

Le fait que $\Gamma\psi^h = 0$ entraîne que μ vérifie au sens des distributions

$$(\tau + V(x))\mu - (\tau + V(x))\nabla V(x) \cdot \nabla_\xi \mu - \xi \nabla_x \mu = \frac{1}{2}(A(\nabla V(x))\mu + \mu A(\nabla V(x))). \quad (11)$$

En utilisant que μ est supportée dans l'ensemble caractéristique $\{\tau + V(x) = \pm |\xi|^2\}$ ainsi que l'équation (11), on obtient (10).

Dans la suite de ce travail, on se contentera de décrire μ dans l'ouvert Ω , laissant les autres cas à d'éventuels développements ultérieurs.

1.2 Structure des trajectoires classiques

La proposition suivante décrit plus précisément la géométrie du croisement de modes dans le cas particulier étudié.

Proposition 2 *Soit $x \in \mathbb{R}^2$ tel que $\nabla V(x) \neq 0$, il existe deux courbes $s \mapsto (x_s^\pm, \xi_s^\pm)$ uniques, continues pour s dans un voisinage de 0 et de classe C^1 pour $s \neq 0$, telles que*

$$\dot{x}_s^\pm = \pm \frac{\xi_s^\pm}{|\xi_s^\pm|}, \quad \dot{\xi}_s^\pm = -\nabla V(x_s^\pm), \quad (12)$$

avec les conditions initiales $x_0^\pm = x$, $\xi_0^\pm = 0$. De plus, (x_s^\pm, ξ_s^\pm) dépendent de façon C^∞ de (s, x) pour $s \neq 0$.

Notons que (12) implique en particulier $\pm \dot{x}_{s=0+}^\pm = \mp \dot{x}_{s=0-}^\pm = -\frac{\nabla V(x)}{|\nabla V(x)|}$.

En d'autres termes, une particule classique atteignant $\{\xi = 0\}$ a le choix entre se réfléchir sur la trajectoire brisée associée au même mode, ou suivre la trajectoire associée à l'autre mode, qui —c'est une particularité du modèle étudié ici— est un prolongement régulier de la trajectoire incidente (*cf.* proposition 6 ci-après). Nous allons voir que cette situation induit un branchement de la mesure semi-classique μ , que nous allons décrire à l'aide d'objets plus précis. L'examen du cas particulier d'un potentiel linéaire va suggérer la nature de ces objets.

2 Le cas particulier d'un potentiel linéaire

On suppose dans cette section $V(x) = x_1$, et, pour fixer les idées, nous nous plaçons dans le cas où les particules classiques atteignent le lieu singulier $\{\xi = 0\}$ au même instant $t = t_0$. Les trajectoires classiques passant par $(x_0, 0)$ à $t = t_0$ sont

$$\begin{aligned} x_t^\pm &= x_0 + (\mp |t_0 - t|, 0), \\ \xi_t^\pm &= (t_0 - t, 0). \end{aligned}$$

Les projecteurs spectraux le long de ces courbes vérifient

$$\begin{aligned} \Pi^+(t) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Pi^-(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{pour } t < t_0, \\ \Pi^+(t) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Pi^-(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{pour } t > t_0. \end{aligned}$$

Par ailleurs le système (3) s'écrit après transformation de Fourier dans la variable d'espace

$$ih\partial_t\widehat{\psi}^h = A(h\xi)\widehat{\psi}^h + i\partial_{\xi_1}\widehat{\psi}^h.$$

Il est alors naturel d'effectuer le changement d'échelle $s = \frac{t}{\sqrt{h}}$ et $\eta = \xi\sqrt{h}$ qui permet d'éliminer le paramètre h de l'équation et de se ramener au système d'équations différentielles ordinaires

$$\frac{1}{i}\partial_s u = \begin{pmatrix} s & -\eta_2 \\ -\eta_2 & -s \end{pmatrix} u, \quad (13)$$

en posant

$$u(s, \eta) = \frac{1}{\sqrt{h}}\widehat{\psi}^h(\sqrt{h}(\eta_1 + s), \frac{-s}{\sqrt{h}}, \frac{\eta_2}{\sqrt{h}}). \quad (14)$$

Près des trajectoires classiques, on a $\xi_1 \sim (t_0 - t)/\sqrt{h}$ donc $s \sim (t - t_0)/\sqrt{h}$, de sorte que le passage de $t < t_0$ à $t > t_0$ pour le système (3) correspond à un problème de scattering pour (13) paramétré par η_2 . Il se trouve que la matrice de scattering pour ce système peut être calculée explicitement en fonction de η_2 , comme l'avaient déjà remarqué Landau [11] et Zener [19] (voir aussi Joye [9] pour un résultat général dans le cadre de la théorie adiabatique). Indiquons comment le résultat de ce calcul nous permet de décrire le branchement de la mesure semi-classique. Observons tout d'abord que, une fois effectué le changement de variable $\xi \mapsto \xi/h$ permettant de passer de la variable de Fourier à la variable impulsion de Wigner, la quantité $\eta_2 = \xi_2/\sqrt{h}$ décrit la concentration à l'échelle \sqrt{h} de la transformée de Wigner sur l'hypersurface $I = \{\xi_2 = 0\}$. Notons $M = \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^2 \times \mathbb{R}_\tau \times \mathbb{R}_\xi^2$ l'espace des phases et désignons par \mathcal{A} l'espace des fonctions de classe C^∞ $a = a(t, x, \tau, \xi, \eta)$ sur $M \times \mathbb{R}$, à valeurs dans les matrices 2×2 , et vérifiant les propriétés suivantes

$$\text{supp}(a) \subset K \times \mathbb{R} \quad (15)$$

où K est une partie compacte de M , et il existe $R > 0$ tel que, pour tout $m \in M$,

$$\forall \eta \geq R, a(m, \pm\eta) = a(m, \pm\infty). \quad (16)$$

On utilise alors le résultat suivant, dû à Miller [13] dans un contexte différent.

Proposition 3 *Il existe une suite (h_k) de réels positifs tendant vers 0 et une mesure positive ν sur $I \times \overline{\mathbb{R}}_\eta$, à valeurs dans les matrices hermitiennes 2×2 , telles que, pour tout $a \in \mathcal{A}$, on ait*

$$\int_M \text{tr} \left(W^h \psi^h(t, x, \tau, \xi) a(t, x, \tau, \xi, \frac{\xi_2}{\sqrt{h}}) \right) dt dx d\tau d\xi \xrightarrow{h \rightarrow 0, h=h_k} \int_{I \times \overline{\mathbb{R}}_\eta} \text{tr}(a(m, \eta)\nu(dm, d\eta)) + \int_{M \setminus I} \text{tr}(a(t, x, \tau, \xi, \xi_2 \infty)\mu(dt, dx, d\tau, d\xi)).$$

Remarques: La proposition ci-dessus vaut pour toute suite (ψ^h) bornée dans L^2 (ou seulement L^2_{loc} , quitte à tronquer).

La connaissance de ν détermine la mesure semi-classique usuelle μ par la formule

$$\mathbf{1}_I \mu(t, x, \tau, \xi) = \int_{\overline{\mathbb{R}}} \nu(t, x, \tau, \xi, d\eta) = p_* \nu(t, x, \tau, \xi) \quad (17)$$

où $p : M \times \overline{\mathbb{R}} \mapsto M$ désigne la première projection.

Dans le cas particulier $V(x) = x_1$, notre résultat principal s'énonce alors de la façon suivante.

Théorème 1 On suppose que (ψ^h) est solution de (3), et que, pour $t < t_0$, la mesure μ^+ est portée par l'ensemble $\{\xi_1 = t_0 - t, \xi_2 = 0\}$, tandis que $\mu^- = 0$. Alors

$$\text{supp}(\mu) \subset \{\xi_2 = 0\} \quad (18)$$

et la mesure ν est donnée par

$$\nu(t, x, \tau, \xi, \eta) = \nu^+(t, x, \tau, \xi, \eta)\Pi^+(\xi) + \nu^-(t, x, \tau, \xi, \eta)\Pi^-(\xi) , \quad (19)$$

où ν^\pm sont des fonctions continues pour $t \neq t_0$ à valeurs dans les mesures positives scalaires, et vérifiant les équations

$$\partial_t \nu^+ + \partial_{x_1} \nu^+ - \partial_{\xi_1} \nu^+ = 0, \quad \nu^- = 0, \quad \text{si } t < t_0, \quad (20)$$

$$\partial_t \nu^+ - \partial_{x_1} \nu^+ - \partial_{\xi_1} \nu^+ = 0, \quad \partial_t \nu^- + \partial_{x_1} \nu^- - \partial_{\xi_1} \nu^- = 0, \quad \text{si } t > t_0, \quad (21)$$

avec les conditions de raccord

$$\nu^+_{|t=t_0^+} = (1 - e^{-\pi\eta^2})\nu^+_{|t=t_0^-} ; \quad \nu^-_{|t=t_0^+} = e^{-\pi\eta^2}\nu^+_{|t=t_0^-}. \quad (22)$$

Remarques: L'hypothèse concernant le temps t_0 a été ajoutée par souci de simplification. Bien entendu, en général, les trajectoires classiques atteindront le lieu singulier $\{\xi = 0\}$ en des temps différents. Nous en tiendrons compte dans l'énoncé intrinsèque que nous donnerons plus loin dans le cas d'un potentiel général (*cf.* le théorème 2).

Les formules (18), (19), (20), (21), (22), permettent de déterminer μ *via* l'identité (17). On constate que, pour $t > t_0$, une partie de la mesure ν^+ est transmise instantanément sur l'autre mode selon la formule

$$\mu^-(t_0^+, x, \tau, \xi) = \int_{\mathbb{R}} e^{-\pi\eta^2} \nu^+(t_0^-, x, \tau, \xi, d\eta) ,$$

tandis que la partie complémentaire est réfléchiée sur le même mode. Notons en particulier que la composante de la mesure ν portée par $\eta = \pm\infty$ est totalement réfléchiée (elle est intuitivement "trop loin" de la variété critique $\{\xi_2 = 0\}$). Les formules (22) peuvent être vues comme des versions deux-microlocales des formules de Landau-Zener (voir [3],[8]).

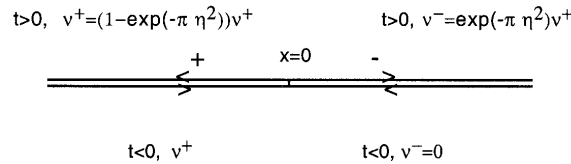


Figure 1

L'hypothèse selon laquelle l'une des deux mesures incidentes ν^\pm (ici ν^-) est nulle évite les interférences entre les deux modes, qui rendraient le problème mal posé en les inconnues ν^\pm . Un phénomène analogue a été mis en évidence par Nier [16] puis Miller [14] dans les problèmes d'interface. Cependant, on peut assouplir cette hypothèse, voir l'énoncé du théorème 3.

3 Mesures semi-classiques à deux échelles associées à une hypersurface quelconque.

La deuxième partie de notre travail consiste à généraliser le théorème 1 au cas d'un potentiel quelconque $V = V(x)$. Dans ce but, nous devons étendre la notion de mesure à deux échelles au cas d'une hypersurface quelconque.

Soit donc (u^h) une famille bornée de $L^2(\mathbb{R}^d)$, notons

$$W^h u^h(x, \xi) = \int_{\mathbb{R}^d} e^{iy \cdot \xi} u^h \left(x - h \frac{y}{2} \right) \overline{u^h} \left(x + h \frac{y}{2} \right) \frac{dy}{(2\pi)^d}$$

la transformée de Wigner de u^h , et μ la mesure semi-classique de (u^h) .

Soit $g : M = T^*\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe C^∞ telle que $dg \neq 0$ sur $I = \{g = 0\}$. on désigne à nouveau par \mathcal{A} l'espace des fonctions $a = a(x, \xi, \eta)$ de classe C^∞ sur $M \times \mathbb{R}_\eta$, à support dans $K \times \mathbb{R}_\eta$, où K est une partie compacte de M , et vérifiant $a(x, \xi, \pm\eta) = a(x, \xi, \pm\infty)$ si $\eta \geq R$.

Proposition 4 *Il existe une suite (h_k) tendant vers 0 et une mesure positive ν_g sur $I \times \overline{\mathbb{R}}$ telles que, pour tout $a \in \mathcal{A}$, on ait*

$$\int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} W^h u^h(x, \xi) a \left(x, \xi, \frac{g(x, \xi)}{\sqrt{h}} \right) dx d\xi \xrightarrow{h \rightarrow 0, h=h_k} \int_{I \times \overline{\mathbb{R}}} a(x, \xi, \eta) d\nu_g(x, \xi, \eta) + \int_{M \setminus I} a(x, \xi, g(x, \xi) \infty) d\mu(x, \xi)$$

Remarques. Dans un souci de simplicité, nous nous sommes limités ici au cas d'une suite de fonctions à valeurs scalaires, de sorte que ν_g est une mesure à valeurs scalaires. La proposition (4) s'étend bien sûr au cas d'une suite de fonctions à valeurs vectorielles, comme à la proposition (3).

Il est commode de représenter la mesure ν_g de façon plus géométrique, en termes de l'hypersurface $I = \{g = 0\}$ seulement. Lorsque m varie dans I , les droites

$$N_m(I) = T_m(M)/T_m(I)$$

s'organisent en un fibré au-dessus de I , appelé fibré normal à I . En compactifiant chaque droite par deux points à l'infini, on obtient un fibré en segments au-dessus de I , que nous noterons $\overline{N}(I)$. Alors l'isomorphisme

$$N_g : (m, [v]) \in N(I) \mapsto (m, dg(m).v) \in I \times \mathbb{R}$$

se prolonge par continuité en un isomorphisme de $\overline{N}(I)$ sur $I \times \overline{\mathbb{R}}$, que nous noterons \overline{N}_g . On vérifie aisément que l'image réciproque ν_I de ν_g par \overline{N}_g dépend seulement de I , et non de l'équation g . De plus, on peut montrer l'invariance de ν_I par transformation canonique en un sens convenable.

Venons-en aux propriétés de ν_I lorsque (u^h) est solution d'une équation aux dérivées partielles. Soit $q : M \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe C^∞ , et soit (Q^h) la famille d'opérateurs pseudodifférentiels semi-classiques associée à q par la quantification de Weyl,

$$Q^h v(x) = \text{op}_h(q)v(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i(x-y) \cdot \xi} q \left(\frac{x+y}{2}, h\xi \right) \frac{dy d\xi}{(2\pi)^d}.$$

La formule ci-dessus a un sens au moins si q a une croissance polynomiale à l'infini en ξ , ce que l'on peut toujours supposer car les propriétés étudiées sont locales en les variables (x, ξ) . Soit $m_0 \in M$ tel que $q(m_0) = 0$, $dq(m_0) \neq 0$, et soit Σ l'hypersurface d'équation $q = 0$ près de m_0 . Soit $I = \{g = 0\}$ une autre hypersurface coupant transversalement Σ en m_0 , i.e.

$$T_{m_0}\Sigma + T_{m_0}I = T_{m_0}M.$$

On suppose que $\Sigma \cap I$ est involutive, c'est-à-dire

$$\{q, g\} = 0 \quad \text{sur} \quad q = g = 0$$

ce que l'on peut encore écrire

$$\{q, g\} = cg + \tilde{c}q, \tag{23}$$

où c, \tilde{c} sont des fonctions C^∞ près de m_0 .

Proposition 5 *Soit (u^h) une suite bornée de $L^2(\mathbb{R}^d)$ telle que, pour toute fonction $\chi \in C^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ à support dans un voisinage donné de m_0 , on ait*

$$\text{op}_h(\chi) Q^h u^h = o(h) \tag{24}$$

dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Alors, dans un voisinage de $\{m_0\} \times \overline{\mathbb{R}}$ dans $M \times \overline{\mathbb{R}}$, la mesure ν_g associée à (u^h) par la proposition (4) est portée par $(\Sigma \cap I) \times \overline{\mathbb{R}}$ et vérifie l'équation de transport

$$\{q, \nu_g\} + c\partial_\eta(\eta\nu_g) = 0, \tag{25}$$

où c est défini par (23).

Notons que l'équation (25) doit se comprendre dans le dual de l'espace \mathcal{A} , en tenant compte de ce que, pour tout $a \in \mathcal{A}$, $\eta\partial_\eta a = 0$ au voisinage de $|\eta| = +\infty$.

Terminons ce paragraphe par une remarque d'invariance. En utilisant l'isomorphisme \overline{N}_g défini plus haut, l'équation (25) prend la forme ${}^tL_q(\nu_I) = 0$, où L_q est un champ de vecteurs sur $\overline{N}(I)$. Bien plus, en transportant ν_I à l'aide de l'isomorphisme naturel

$$\theta_{\Sigma, I} : N_\Sigma(\Sigma \cap I) = \frac{T(\Sigma)}{T(\Sigma \cap I)} \rightarrow N(I)|_{\Sigma \cap I}$$

au-dessus de $\Sigma \cap I$, on obtient une mesure qui ne dépend que de l'intersection $\Sigma \cap I$, solution d'une équation de transport sur $\overline{N}_\Sigma(\Sigma \cap I)$ donnée par la première variation dans Σ du flot hamiltonien de q (en particulier cette équation ne dépend que de $\Sigma \cap I$).

4 Une formule de Landau-Zener pour un potentiel quelconque.

Revenons au système (3). Fixons un point $m_0 = (t_0, x_0, \tau_0, \xi_0) \in M = T^*(\mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^2)$, tel que $\xi_0 = 0$, $\tau_0 + V(x_0) = 0$, $\nabla V(x_0) \neq 0$. Avec les notations de la proposition 2, on désigne par $J^{\pm, p}$ (resp. $J^{\pm, f}$) l'ensemble des points du type $(t + s, x_s^\pm, \tau, \xi_s^\pm)$ où $m = (t, x, \tau, 0)$ décrit un voisinage Ω de m_0 dans l'ensemble $S = \{\xi = 0, \tau + V(x) = 0\}$, et $s \in]-\epsilon, 0]$ (resp. $s \in [0, \epsilon[$), où ϵ est assez petit. Le fait que $\nabla V(x_0) \neq 0$ assure que $J^{\pm, p}$ et $J^{\pm, f}$ sont des sous-variétés de codimension 2 dont le bord commun est $\{\xi = 0\}$.

Proposition 6 Les sous-variétés $J^{+,p}$, $J^{-,f}$ d'une part et $J^{-,p}$, $J^{+,f}$ d'autre part se recolent en des sous-variétés C^∞ sans bord que nous noterons J , J' , et qui se coupent transversalement en S .

En outre, il existe une fonction ϕ de classe C^∞ dans un voisinage de (x_0, τ_0) telle que $J = \{\xi = \nabla\phi(x, \tau)\}$, $J' = \{\xi = -\nabla\phi(x, \tau)\}$. De plus

$$|\tau + V(x)| = |\nabla\phi(x, \tau)|. \quad (26)$$

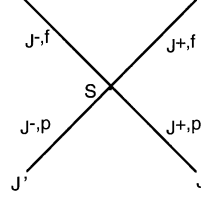


Figure 2

Preuve: Soit $J = J^{+,p} \cup J^{-,f}$. Soit Λ_{τ_0} la projection de $J \cap \{\tau = \tau_0\}$ sur l'espace $T^*(\mathbb{R}_x^2)$. On a alors $(t, x, \tau_0, \xi) \in J$ si et seulement si $(x, \xi) \in \Lambda_{\tau_0}$.

L'ensemble Λ_{τ_0} , construit par le flot hamiltonien de $\tau_0 + V(x) \pm |\xi|$, est une sous variété lagrangienne de $T^*(\mathbb{R}_x^2)$ que nous noterons Λ_{τ_0} . De plus, on peut décrire Λ_{τ_0} de la façon suivante:

$$\Lambda_{\tau_0} = \{(X_s(x), \Xi_s(x)); \exists t \in \mathbb{R}, (t + s, x, \tau_0, 0) \in \Omega \cap S\},$$

où $X_s(x)$ et $\Xi_s(x)$ sont solutions du système

$$\dot{X}_s = -\text{sgn}(s) \frac{\Xi_s}{|\Xi_s|}, \quad X_0 = x, \quad \dot{\Xi}_s = -\nabla V(X_s), \quad \Xi_0 = 0. \quad (27)$$

En remarquant qu'une solution de (27) doit vérifier

$$\Xi_s = -s \int_0^1 \nabla V(X_{st}) dt, \quad X_s = x + \int_0^s \frac{\int_0^1 \nabla V(X_{\sigma t}) dt}{|\int_0^1 \nabla V(X_{\sigma t}) dt|},$$

on voit que l'hypothèse $\nabla V(x) \neq 0$ nous assure que le système (27) admet des solutions.

De même $(t, x, \tau_0, \xi) \in J'$ si et seulement si $(x, \xi) \in \Lambda'_{\tau_0}$ avec

$$\Lambda'_{\tau_0} = \{(X'_s(x), \Xi'_s(x)); \exists t \in \mathbb{R}, (t + s, x, \tau_0, 0) \in \Omega \cap S\},$$

et $X'_s(x)$ et $\Xi'_s(x)$ solutions du système

$$\dot{X}'_s = \text{sgn}(s) \frac{\Xi'_s}{|\Xi'_s|}, \quad X'_0 = x, \quad \dot{\Xi}'_s = -\nabla V(X'_s), \quad \Xi'_0 = 0, \quad (28)$$

lequel admet des solutions lorsque $\nabla V(x) \neq 0$.

Ceci permet de construire les courbes (x_s^\pm, ξ_s^\pm) de la proposition 2 et d'obtenir la première partie de la proposition 6. Attachons-nous maintenant à décrire Λ_{τ_0} et Λ'_{τ_0} .

On vérifie aisément que $X_{-s}(x) = X'_s(x)$ et $\Xi_{-s}(x) = \Xi'_s(x)$, ce qui entraîne que si $(x, \xi) \in \Lambda_{\tau_0}$ alors $(x, -\xi) \in \Lambda'_{\tau_0}$. De plus, la première projection restreinte à Λ_{τ_0} est de rang maximal, Λ_{τ_0} admet donc un système d'équations locales de la forme $\xi = \nabla_x \phi(x, \tau_0)$ où la fonction ϕ peut être choisie de sorte qu'elle dépende régulièrement du paramètre τ_0 .

Notons enfin que la formule (26) traduit le fait que $J \cup J' \subset \Sigma = \{|\tau_0 + V(x)| = |\xi|\}$ et nous aurons terminé la preuve de la proposition 6. \diamond

On définit alors $\omega = \omega(x, \tau)$ par la formule

$$\nabla\phi(x, \tau) = (\tau + V(x))\omega(x, \tau),$$

et on note

$$I = \{m = (t, x, \tau, \xi) / \xi \wedge \omega(x, \tau) = 0\}.$$

On vérifie que I est une hypersurface coupant transversalement

$$\Sigma^+ = \{\tau + V(x) + |\xi| = 0, \xi \neq 0\} \text{ et } \Sigma^- = \{\tau + V(x) - |\xi| = 0, \xi \neq 0\}.$$

De plus $\Sigma^\pm \cap I = (J^{\pm,p} \cup J^{\pm,f}) \setminus S$ sont des sous-variétés involutives de M . En utilisant la proposition 5, on a hors du lieu singulier le théorème de propagation suivant:

Théorème 2 *On suppose que (ψ^h) est solution de (3). On désigne par ν la mesure semi-classique à deux échelles associée à I munie de l'équation $\{\xi \wedge \omega(x, \tau) = 0\}$. Alors*

$$\nu(t, x, \tau, \xi, \eta) = \nu^+(t, x, \tau, \xi, \eta)\Pi^+(\xi) + \nu^-(t, x, \tau, \xi, \eta)\Pi^-(\xi),$$

où ν^\pm sont des mesures positives sur $I \times \overline{\mathbb{R}}$, portées respectivement par $\Sigma^\pm \cap I$ et vérifiant les équations

$$\partial_t \nu^\pm \pm \frac{\xi}{|\xi|} \cdot \nabla_x \nu^\pm - \nabla V(x) \cdot \nabla_\xi \nu^\pm - (\nabla \cdot \omega) \partial_\eta (\eta \nu^\pm) = 0, \quad (29)$$

au-dessus de $J^{\pm,p} \setminus S$, et

$$\partial_t \nu^\pm \pm \frac{\xi}{|\xi|} \cdot \nabla_x \nu^\pm - \nabla V(x) \cdot \nabla_\xi \nu^\pm + (\nabla \cdot \omega) \partial_\eta (\eta \nu^\pm) = 0, \quad (30)$$

au-dessus de $J^{\pm,f} \setminus S$.

Venons-en aux conditions de raccord au-dessus du lieu singulier S . Puisque $\nabla V(x) \neq 0$, les champs de vecteurs apparaissant dans les équations (29) et (30) sont transverses à la sous-variété $\overline{N}(I)|_{\{\xi=0\}}$. En conséquence, les mesures ν^\pm au-dessus de $J^{\pm,p}$ (resp. au-dessus de $J^{\pm,f}$) ont, au sens des distributions, des traces $\nu^{\pm,p}$ (resp. $\nu^{\pm,f}$) sur $\overline{N}(I)|_S$ qui sont des mesures positives. Notre résultat principal est alors

Théorème 3 *On suppose que $\nu^{+,p}$ et $\nu^{-,p}$ sont étrangères sur l'ensemble $\{|\eta| < \infty\}$. Alors*

$$\begin{pmatrix} \nu^{+,f} \\ \nu^{-,f} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - T & T \\ T & 1 - T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu^{+,p} \\ \nu^{-,p} \end{pmatrix} \quad (31)$$

où $T(t, x, \eta) = e^{-\pi\eta^2/|\nabla V(x)|}$.

5 Etapes de la démonstration du théorème 3

La démonstration comprend trois étapes. Par transformation canonique, nous ramenons d'abord le système 3 au système suivant

$$\text{op}_h(Q)u^h = o(h) \text{ avec } Q(s, z, \sigma, \zeta) = \begin{pmatrix} \sigma + s & \alpha\zeta_2 \\ \alpha\zeta_2 & \sigma - s \end{pmatrix}, \quad (32)$$

où $\alpha = \alpha(\sigma, z)$ est une fonction \mathcal{C}^∞ ne s'annulant pas. L'hypersurface correspondant à I est alors $\{\zeta_2 = 0\}$.

La deuxième étape consiste à établir la formule (31) sur le domaine $\{|\eta| = \infty\}$, grâce à une estimation hyperbolique satisfaite par le système (32).

Dans la troisième étape, on montre dans l'esprit de [1], [10] et [18] que le système (32) admet sur $\{|\eta| < \infty\}$ la forme normale 2-microlocale correspondant à $\alpha = Cte$, ce qui ramène au cas du potentiel linéaire décrit dans la section 2 ci-dessus.

5.1 Réduction à un problème modèle

Nous allons commencer par faire un changement de fonctions inconnues. Soit R_θ la matrice de rotation d'angle θ ,

$$R_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

où θ est défini par $(\cos(2\theta), -\sin(2\theta)) = \omega(x, \tau)$. Soit $R = \text{op}_h(R_{\theta(x, \tau)})$ alors $\phi^h = R\psi^h$ vérifie

$$\text{op}_h(\tilde{Q}(t, x, \tau, \xi))\phi^h = 0 \quad (33)$$

où

$$\tilde{Q}(t, x, \tau, \xi) = \tau + V(x) + \begin{pmatrix} \omega(x, \tau) \cdot \xi & \omega(x, \tau) \wedge \xi \\ \omega(x, \tau) \wedge \xi & -\omega(x, \tau) \cdot \xi \end{pmatrix}.$$

On voit apparaître explicitement l'équation de I dans \tilde{Q} et la transformation canonique suivante va ramener le système (33) au système (32).

Proposition 7 *Il existe une transformation canonique locale κ sur $T^*\mathbb{R}^3$, $\kappa(t, x, \tau, \xi) = (s, z, \sigma, \zeta)$, telle que*

$$\sigma = \lambda(x, \tau)(\tau + V(x)), \quad s = -\lambda(x, \tau)\omega(x, \tau) \cdot \xi, \quad \zeta_2 = \lambda(x, \tau)\mu(x, \tau)\omega(x, \tau) \wedge \xi, \quad (34)$$

les fonctions λ et μ ne s'annulant pas.

La proposition 7 nous conduit à étudier la concentration sur $\zeta_2 = 0$ près de $s = \sigma = \zeta_2 = 0$, à l'échelle \sqrt{h} d'une famille uniformément bornée dans L^2 satisfaisant à (32) où $\alpha = \frac{1}{\mu}$ est une fonction régulière ne s'annulant pas.

5.2 Une estimation d'énergie hyperbolique pour le problème modèle

Soit u^h une famille satisfaisant à (32), on a l'estimation suivante qui permet de montrer la réflexion de la partie $\nu(\pm\infty)$.

Proposition 8 *Soit $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ telle que $\chi(0) = 1$, alors il existe $\epsilon > 0$ et $h_0 > 0$ tel que $(\chi(\frac{hD_z}{\epsilon})u^h)_{h < h_0}$ soit bornée dans $L_s^\infty(\mathbb{R}_s, L^2(\mathbb{R}_z))$.*

Soit χ et ϵ donnés comme ci-dessus et $v^h(z) = \chi(\frac{hD_z}{\epsilon})u^h(z)$, la suite (v^h) vérifie

$$\text{op}_h(A_\epsilon)v^h = o_\epsilon(h),$$

où $A_\epsilon = \begin{pmatrix} \sigma + s & \tilde{\chi}(\frac{\zeta}{\epsilon})\alpha(\sigma, z)\zeta \\ \tilde{\chi}(\frac{\zeta}{\epsilon})\alpha(\sigma, z)\zeta & \sigma - s \end{pmatrix}$, où $\tilde{\chi}$ est une fonction de troncature vérifiant $\tilde{\chi}\chi = 1$.

On met alors en oeuvre la méthode d'énergie en variable s en tenant compte du caractère auto-adjoint de A_ϵ . La dépendance en σ de $\alpha(\sigma, z)$ fait apparaître un terme en $\|v^h\|_{L_s^\infty(L_z^2)}$ que la présence de la troncature $\tilde{\chi}(\frac{\zeta}{\epsilon})$ devant ζ permet d'absorber.

5.3 Une forme normale à distance finie

Il reste à établir les formules de Landau-Zener pour la partie $\nu(\eta)$, $|\eta| < +\infty$. Commençons par analyser les différents rôles des variables σ et z dans (32) : la variable z_1 est un simple paramètre, la variable z_2 n'est pas très gênante car le cas $\alpha = \alpha(z_2)$ se ramène à l'étude du système (13) par un simple changement de variables en z_2 . L'unique difficulté est introduite par la variable σ . Il nous suffit donc de montrer que le système (32) admet une forme normale avec $\alpha = \alpha(z)$. Nous travaillons à l'échelle 2-microlocale (c'est-à-dire après changement de la variable ζ_2 en $\sqrt{h}\eta$) dans des domaines où la variable η est bornée.

Proposition 9 *Il existe deux matrices $C_h(\sigma, z, \eta)$ et $\tilde{C}_h(\sigma, z, \eta)$,*

$$\begin{aligned} C_h(\sigma, z, \eta) &= C_0(\sigma, z, \eta) + \sqrt{h}C_1(\sigma, z, \eta) + hC_2(\sigma, z, \eta), \\ \tilde{C}_h(\sigma, z, \eta) &= \tilde{C}_0(\sigma, z, \eta) + \sqrt{h}\tilde{C}_1(\sigma, z, \eta) + h\tilde{C}_2(\sigma, z, \eta), \end{aligned}$$

telles que pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}_{(s,\sigma)}^2 \times \mathbb{R}_{(z,\zeta)}^4 \times \mathbb{R}_\eta)$,

$$\| \text{op}_h(a(s, \sigma, z, \zeta, \frac{\zeta_2}{\sqrt{h}})) [\text{op}_h(\tilde{Q})\text{op}_h(C_h) - \text{op}_h(\tilde{C}_h)\text{op}_h(Q_0)] \|_{\mathcal{L}(L^2)} = O(h\sqrt{h}) \quad (35)$$

avec C_0, \tilde{C}_0 unitaires et

$$Q_0(s, z, \sigma, \zeta) = \begin{pmatrix} \sigma + s & \alpha(0, z)\zeta_2 \\ \alpha(0, z)\zeta_2 & \sigma - s \end{pmatrix}.$$

On est ainsi ramené aux formules de Landau-Zener pour un potentiel linéaire, qui sont l'objet du paragraphe 2.

References

- [1] S. Alinhac: Branching of singularities for a class of hyperbolic operators. *Indiana Univ. Math. J.* **27**, N° 6, (1978), p. 1027-1037.
- [2] A. P. Calderón, R. Vaillancourt: On the boundedness of pseudo-differential operators. *J. Math. Soc. Japan* **23**, N° 2, (1971), p. 374-378.
- [3] Y. Colin de Verdière, M. Lombardi, J. Pollet: The microlocal Landau-Zener formula. *Ann. Inst. Henri Poincaré*, **71**, N°1, (1999), p.95-127.
- [4] P. Gérard: Mesures semi-classiques et ondes de Bloch, Exposé de l'Ecole Polytechnique, E.D.P., Exposé N°XVI, (1991).
- [5] P. Gérard, E. Leichtnam: Ergodic Properties of Eigenfunctions for the Dirichlet Problem. *Duke Math. J.*, **71**, (1993), 559-607.
- [6] P. Gérard, P. A. Markowich, N. J. Mauser, F. Poupaud: Homogenization Limits and Wigner Transforms. *Comm. Pure Appl. Math.*, **50**, (1997), 4, 323-379.
- [7] 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.
- [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°1, (1998), p.85-134.
- [9] A. Joye: Proof of the Landau-Zener formula. *Asymptotic Analysis* **9**, (1994), p.209-258.
- [10] N. Kaidi, M. Rouleux: Forme normale d'un hamiltonien à deux niveaux près d'un point de branchement (limite semi-classique), *C.R. Acad. Sci. Paris Série I Math*, 317, (1993), N°4, p.359-364.
- [11] L. Landau: *Collected papers of L. Landau*, Pergamon Press, (1965).
- [12] P-L. Lions, T. Paul: Sur les mesures de Wigner. *Revista Matemática Iberoamericana*, **9**, (1993), 553-618.
- [13] L. Miller: Propagation d'onde semi-classiques à travers une interface et mesures 2-microlocales. *Thèse de l'Ecole Polytechnique*, 1996.
- [14] L. Miller: Refraction of high-frequency waves density by sharp interfaces and semiclassical measures at the boundary, *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, **79**, (2000), p.227-269.
- [15] P.A. Markowich, N.J. Mauser, F. Poupaud: A Wigner function approach to semi-classical limits: electrons in a periodic potential, *J. Math. Phys.*, **35**, (1994), p.1066-1094.
- [16] F. Nier: A Semi-Classical Picture of Quantum Scattering, *Ann. Scient. Ec. Norm. Sup.*, 4^e série, **29**, (1996), p.149-183.
- [17] F. Poupaud, C. Ringhofer: Semi-classical limits in a crystal with exterior potentials and effective mass theorems, *Comm. Part. Diff. Eq.*, **21**, (1996), N°11-12, p.1897-1918.

- [18] M. Rouleux: Tunelling effects for \hbar pseudodifferential operators, Feshback resonances, and the Born-Oppenheimer approximation, dans *Evolution equations* édité par M. Demuth, E. Schrohe, B. W. Schulze, J. Sjöstrand, Advances in P.D.E.
- [19] C. Zener: Non-adiabatic crossing of energy levels, *Proc. Roy. Soc. Lond.* **137**, (1932), p.696-702.

Adresses: C. Fermanian Kammerer: Université de Cergy-Pontoise, Mathématiques, 2 avenue Adolphe Chauvin, BP 222, Pontoise, 95 302 Cergy-Pontoise cedex, France.
P. Gérard: Université Paris XI, Mathématiques, BAT. 425, 91405 Orsay, France.
e-mail: Clotilde.Fermanian@math.u-cergy.fr, Patrick.GERARD@math.u-psud.fr