LA FORMULE DE LANDAU-ZENER MICROLOCALE

YVES COLIN DE VERDIÈRE*, **
MAURICE LOMBARDI***
JOËL POLLET***

* Institut Universitaire de France
** Institut Fourier, UMR CNRS-UJF 5582
BP 74, 38402-Saint Martin d'Hères Cedex (France)
yves.colin-de-verdiere@ujf-grenoble.fr
*** Laboratoire de Spectrométrie physique, UMR CNRS-UJF 5588
BP 87, 38402-Saint Martin d'Hères Cedex (France)
maurice.lombardi@ujf-grenoble.fr

Résumé. On décrit les solutions microlocales d'un système 2×2 d'opérateurs pseudo-différentiels (OPD) sur $\mathbb{R}$ près d'un croisement évité (*système à 2 niveaux*). On en déduit une formule du type Landau-Zener pour la limite classique d'équations de Schrödinger couplées. Les formules obtenues sont uniformes dans l'ensemble des paramètres (constante de Planck et constante de couplage), donnent lieu à un développement asymptotique complet uniquement déterminé et permettent d'accéder de façon simple aux phases pour calculer les conditions de quantification. Une version moins précise des résultats a été obtenue par Joël Pollet dans sa thèse [15]. Les conditions de quantification sont traitées dans [4] (en préparation). Voir aussi [18] pour le cas des résonances. Une extension au cas de l'équation de Schrödinger dépendant du temps rejoignant les travaux de Hagedorn [8] et Hagedorn-Joye [9] et basée sur les travaux [14], [6] et [20] est en préparation.

1. Introduction

La *formule de Landau-Zener* ([12], [21]) dans le régime *adiabatique* est prouvée dans [7] et [10] : il s'agit de décrire le comportement des solutions de

$$i\frac{du}{dt} = H(\varepsilon t)u \tag{1}$$

Date: 18 mars 1998.
Classification mathématique. 34C20, 34E20, 35Q40, 35S30, 81Q20.
Mots clés. Opérateur pseudo-différentiel, semi-classique, microlocal, système à 2 niveaux, formule de Landau-Zener, limite adiabatique, symbole sous-principal, lemme de Morse.

lorsque $\varepsilon \to 0$ où $H(t)$ est un Hamiltonien présentant un presque-croisement de deux valeurs propres pour un certain t_0. Des formules plus fines sont données dans [11].

La *formule de Landau-Zener* pour la propagation semi-classique des *états cohérents* dans l'approximation de Born-Oppenheimer (i.e. pour des systèmes semi-classiques) est montrée par Hagedorn et Hagedorn-Joye ([8], [9]).

On présente ici une formule de type *Landau-Zener* pour les solutions d'un système hamiltonien semi-classique à 2 niveaux en dimension 1. Plus précisément, on étudie les *solutions microlocales* d'un système 2×2 d'opérateurs pseudo-différentiels (OPD)

$$H \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_1 & \epsilon W \\ \epsilon W^\star & P_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \ , \tag{2}$$

où ϵ est le paramètre de couplage. P_1, P_2 et W sont des OPD d'ordre 0 et les P_j sont autoadjoints. On se place près d'un point z_0 de $T^\star\mathbb{R}$ tels que les symboles principaux p_j de P_j s'annulent en z_0 et ont des différentielles indépendantes en ce point. On suppose que ϵW crée un *croisement évité* et donc que le symbole principal de W en z_0 est non nul. On pourrait étendre sans difficultés les résultats au cas où P_j et W dépendent aussi de ϵ, en effet il suffit d'appeler α la paramètre donnant cette dépendance, de savoir que les résultats sont tous uniformes en α et de faire $\alpha = \epsilon$ à la fin.

Le cas général précédent recouvre 2 cas particuliers classiques :

Exemple 1.1. : limite semi-classique d'un systèmes d'équations de Schrödinger couplées.
Les P_j sont des opérateurs de Schrödinger à une variable

$$P_j = -\frac{h^2}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V_j(x) - E \tag{3}$$

et W une constante complexe non nulle. On suppose ici que $V_1(x_0) = V_2(x_0) < E$, $V_1'(x_0) \neq V_2'(x_0)$ et on a $z_0 = (x_0, \pm\sqrt{2(E - V_1(x_0))})$.

Exemple 1.2. : équation de Schrödinger adiabatique.
On considère l'équation (1) que l'on peut réécrire

$$\epsilon i \frac{du}{dt} = H(t) u \ ,$$

où l'on suppose

$$H(t) = \begin{pmatrix} \lambda_1(t) & \eta W(t) \\ \eta \bar{W}(t) & \lambda_2(t) \end{pmatrix} . \tag{4}$$

On a alors :

$$P_j = \frac{h}{i}\frac{d}{dt} + \lambda_j(t) \ . \tag{5}$$

On suppose $\lambda_1(t_0) = \lambda_2(t_0)$, $\lambda_1'(t_0) \neq \lambda_2'(t_0)$ *et* $W(t_0) \neq 0$. *On a alors :*

$$z_0 = (t_0, -\lambda_1(t_0)) \ .$$

L'intérêt de considérer cette situation générale est que les résultats peuvent aussi s'appliquer à tout système de n équations de Schrödinger sur $\mathbb{R}$ couplées près d'un croisement transverse de deux des valeurs propres. On peut de même considérer la situation adiabatique (équation (1)) en dimension arbitraire près d'un croisement évité de 2 valeurs propres séparées du reste du spectre.

Dans tout cet article, les opérateurs pseudo-différentiels considérés sont les OPD à petit paramètre tels que présentés par exemple dans le livre [16].

On se place près d'un point de croisement transverse z_0 des courbes caractéristiques $Z_j = \{p_j = 0\}$, $j = 1, 2$. Les Z_j sont orientées par les champs hamiltoniens des p_j. On suppose en outre que W est elliptique en z_0. On note w_0 la valeur du symbole principal de W en z_0.

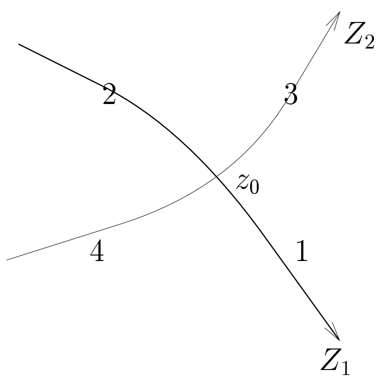

FIGURE 1. les Z_j et z_0

On associe à la situation précédente un opérateur de transfert

$$T = \begin{pmatrix} t_{1,2} & t_{1,4} \\ t_{3,2} & t_{3,4} \end{pmatrix} \tag{6}$$

qui relie les solutions microlocales entrantes à celles qui sortent par la condition de se prolonger en une solution microlocale au voisinage du point de croisement. Une telle matrice est unitaire pour un *courant* $J_\varphi^\pm$. On calcule explicitement l'asymptotique des modules des coefficients de T dans une base orthomormée de solutions microlocales sur chaque branche. On obtient une formule de *Landau-Zener* qui s'écrit

(7)

$$|t_{1,2}| = |t_{3,4}| + O(h^\infty) = \exp\left(-\frac{\pi}{h}\left(\frac{|w_0|^2}{|\{p_1, p_2\}(z_0)|}\epsilon^2 + O(\epsilon^4) + O(h^2) \right) \right) + O(h^\infty).$$

En fait on montre plus précisément que l'argument de l'exponentielle est de la forme $\frac{\pi}{h}\Phi(\epsilon^2, h)$ où Φ est un symbole classique en h de la forme

$$\Phi \sim \sum_{k=0}^{\infty} \Phi_k(\epsilon^2)h^k$$

avec les Φ_k C^∞.

Par rapport à [13] (voir en particulier le théorème 5.1) et à la littérature existante, relevons les points suivants :

–*Les résultats sont valables sans hypothèse d'analyticité.*

–*Les résultats sont locaux (et même microlocaux).*

–*On a un développement asymptotique complet par rpport aux 2 petits paramètres ϵ et h.*

–*Les résultats décrivent de façon uniforme la transition entre le régime adiabatique et le régime non couplé.*

Le régime transitoire se produit lorsque ϵ est de l'ordre de $\sqrt{h}$. Si $\epsilon >> \sqrt{h}$ (région II) l'approximation adiabatique marche ($|t_{1,2}| = O(h^\infty)$) et on se ramène à 2 équations scalaires. Si $\epsilon << \sqrt{h}$ (région I) les 2 équations sont découplés à l'ordre principal.

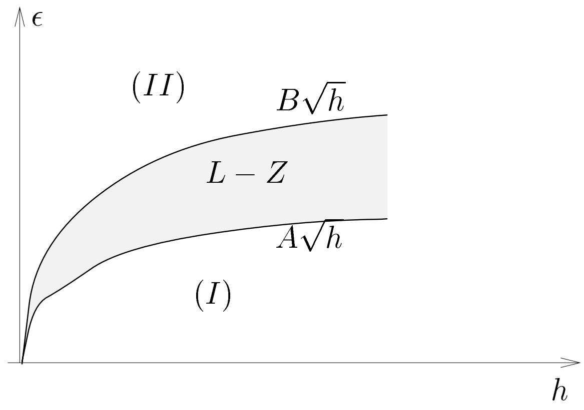

FIGURE 2. le plan des paramètres

La démarche consiste à donner une nouvelle formulation du *lemme de Morse semi-classique* énoncé dans [2] valable pour une déformation Q_α d'un OPD scalaire Q_0 près d'un point col. L'ellipticité de W en z_0 permet de se ramener pour u à une telle déformation $Q_\alpha = WP_2W^{-1}P_1 - \alpha WW^\star$ avec $\alpha = \epsilon^2$. On montre alors que l'équation $Q_\alpha u = 0$ est microlocalement équivalente à

$$\left(\frac{h}{i}y\frac{d}{dy} - \Phi(\alpha, h)\right)\tilde{u} = 0$$

près de $(0, 0)$. Cette équation admet un espace de dimension 2 de solutions microlocales qui sont analysées en détail dans [2].

2. Déformations des points cols

2.1. **Le contexte.** Soient $p_j,\ j=1,2$ deux fonctions C^∞ de $T^\star\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$. On suppose qu'on se place près d'un point $z_0 \in T^\star\mathbb{R}$ (*point col*) tel que

(8)
$p_1(z_0)=p_2(z_0)=0$ et les différentielles $dp_1(z_0)$, $dp_2(z_0)$ sont indépendantes.

Soit Q_α, où α est un paramètre réel variant dans un voisinage fixe de 0, un $h-$OPD d'ordre 0 dépendant de façon C^∞ de α. On note q_α le symbole principal de Q_α et on suppose $q_0=p_1p_2$ et $\frac{d}{d\alpha}q_\alpha(z_0)=\omega_0\neq 0$: ω_0 est la dérivée en $\alpha=0$ de la valeur critique de q_α.

2.2. **La forme normale.** Le théorème suivant donne une variante du lemme de Morse isochore de [5] et de son pendant semi-classique [2]. L'avantage est de ne pas utiliser le calcul fonctionnel, ni le caractère autoadjoint des hamiltoniens (on suppose seulement les symboles principaux réels).

Théorème 1. **(a)** *Il existe des familles C^∞ de germes de transformations canoniques $\chi_\alpha : (\mathbb{R}^2, O) \to (\mathbb{R}^2, z_\alpha)$ et de fonctions $e_\alpha(y,\eta)$ telles que $q_\alpha\circ\chi_\alpha = e_\alpha(y,\eta)(y\eta-\Phi_0(\alpha))$.*

La fonction C^∞ Φ_0 n'est pas unique, mais son développement de Taylor

$$\Phi_0(\alpha)\sim\sum_{j=1}^{\infty}c_{0,j}\alpha^j$$

l'est et on a :

$$c_{0,1}=\pm\frac{\omega_0}{\{p_1,p_2\}(z_0)} \tag{9}$$

où le signe dépend du choix de χ_α (voir la section 2.3).

(b) *Il existe un OIF (opérateur intégral de Fourier) U_α associé à χ_α et un OPD E_α elliptique en O tels que l'on ait, microlocalement près de O :*

$$U_\alpha^{-1}\circ Q_\alpha\circ U_\alpha = E_\alpha\circ\left(\frac{h}{i}y\frac{d}{dy}-\Phi(\alpha,h)\right) \tag{10}$$

où Φ est un symbole en h de la forme

$$\Phi\sim\sum_{k=0}^{\infty}\Phi_k(\alpha)h^k \tag{11}$$

Les Φ_k sont C^∞ et ont des développements de Taylor uniquement déterminés

$$\Phi_k(\alpha)\sim\sum_{j=0}^{\infty}c_{k,j}\alpha^j\ .$$

(c) *Si $Q_0=P_2P_1$, $\Phi_1(0)=c_{1,0}=0$. On a donc dans ce cas*

$$\Phi=c_{0,1}\alpha+O(\alpha^2)+O(h^2)\ .$$

2.3. **Choix des branches.** Le crochet de Poisson est défini par :

$$\{f,g\} = \frac{\partial f}{\partial \xi}\frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial g}{\partial \xi} \ .$$

On peut toujours choisir χ de façon à faire correspondre les courbes $p_1 = 0$ avec $\eta = 0$ et $p_2 = 0$ avec $y = 0$ (voir figure 3).

Le signe de $e_0(O)$ est $\pm$ suivant que l'image par χ du quadrant $\{y > 0,\ \eta > 0\}$ vérifie $p_1 p_2 > 0$ ou < 0. Comme $p_1 \circ \chi = f_1 \eta$ et $p_2 \circ \chi = f_2 y$ avec $f_1(O)f_2(O) = e_0(O)$, on a la relation :

$$\{p_1, p_2\}(z_0) = e_0(O)\{\eta, y\}(O) = e_0(O) \tag{12}$$

par l'invariance du crochet de Poisson et

$$\omega_0 = -e_0(O)c_{0,1}$$

par le calcul de la dérivée en $\alpha = 0$ de la valeur critique. D'où la formule (9) avec un $-$. On aurait un $+$ si on avait la correspondance opposée entre les axes et les courbes caractéristiques des p_j.

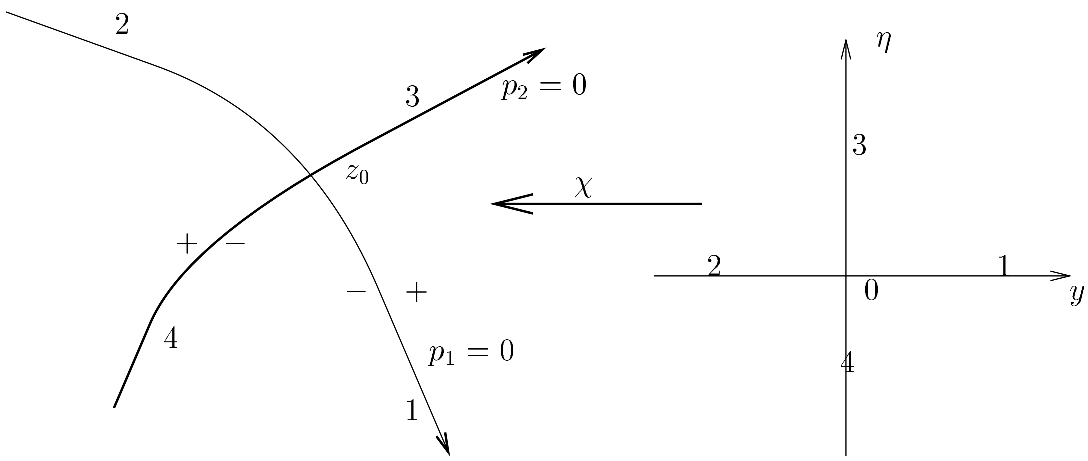

FIGURE 3. numérotation des branches

2.4. **Preuve du théorème 1 : partie (a).** Le lemme de Morse isochore [5] donne l'existence de transformations canoniques χ_α telles que

$$q_\alpha \circ \chi_\alpha = f_\alpha(y\eta)$$

avec f_α C^∞ et dépendant de façon C^∞ de α, $f_0(0) = 0$, $f'_\alpha(0) \neq 0$. Le théorème des fonctions implicites garantit que f_α a un zéro $\Phi_0(\alpha)$ tel que $\Phi_0(0) = 0$. On écrit alors

$$f_\alpha(t) = e_\alpha(t)(t - \Phi_0(\alpha)) \ ,$$

et on a $\Phi'_0(0) \neq 0$ par un calcul de la dérivée en $\alpha = 0$ de la valeur critique de q_α.

On suppose dans la suite de cette section que $e_0(O) > 0$. L'unicité résulte de l'existence d'un développement asymptotique singulier (i.e. contenant des termes logarithmiques) de

$$I_\varphi(\alpha) = \int_{\{p_\alpha \le 0\}} \varphi |dxdy| = \int_{\{y\eta \le \Phi_0(\alpha)\}} \varphi \circ \chi |dyd\eta|$$

où $\varphi \in C_o^\infty$ est identique à 1 près de z_0, on a :

$$I_\varphi(\alpha) = -2\Phi_0(\alpha) \log |\Phi_0(\alpha)| + \Psi(\alpha)$$

où Ψ est C^∞. On a donc :

$$I_\varphi(\alpha) \sim \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \alpha^k \log |\alpha| + b_k(\varphi)\alpha^k)$$

ce qui détermine les a_k (qui sont eux indépendants de φ) dont on déduit les coefficients du développement de Taylor de Φ_0.

2.5. **Preuve du théorème 1 : partie (b), existence.** On omet d'écrire explicitement la dépendance en α dans la suite.

Si U est un OIF associé à χ, on a, d'après le théorème d'Egorov :

$$U^{-1} Q U = E(\Pi + R_1) \tag{13}$$

avec E (resp. R_1) des OPD d'ordre 0 (resp. 1) et de symboles principaux e (resp. r_1). Ici $\Pi = \frac{h}{i} y \frac{d}{dy} - \Phi_0$. On doit donc trouver P OPD d'ordre 0 et de symbole principal e^{is} tel que :

$$P^{-1}(\Pi + R_1)P = (\mathrm{Id} + E_1)(\Pi - h\Phi_1 + R_2) \tag{14}$$

avec E_1 (resp. R_2) OPD d'ordre 1 (resp. 2) et de symbole principal e_1 (resp. r_2). Ecrivant les symboles principaux d'ordre 1, il vient :

$$\{y\eta, s\} = -r_1 - \Phi_1 + e_1(y\eta - \Phi_0) \ . \tag{15}$$

Ici les inconnues sont s, Φ_1 et e_1. On sait (voir [5] ou [2]) qu'une telle équation en s peut se résoudre si et seulement si il n'y a pas de termes résonants, i.e. de puissances de $y\eta$ dans la série de Taylor du second membre. Cela conduit à un système infini d'équations pour les coefficients de Taylor de e_1 et pour Φ_1 ; si $e_1 \sim \sum_{j=0}^{\infty} x_j (y\eta)^j$, on doit résoudre le système :

$$x_{j-1} - \Phi_0(\alpha)x_j = r_j(\alpha) \ (j = 0, 1, \cdots) \tag{16}$$

avec $x_{-1} = \Phi_1$. Les r_j sont les coefficients de $(y\eta)^j$ dans le développement de Taylor de r_1. On résoud ce système de façon C^∞ en α grâce au lemme 1. Pour cela on pose $\Phi_0(\alpha) = \beta$ et on cherche les x_j comme fonctions C^∞ de β.

On itère ensuite le procéder par conjugaison avec des OPD $\mathrm{Id}+S_l$ où $l = 1, \cdots$,.

2.6. **Un lemme.**

Lemme 1. *On considère le système infini d'équations* $(\star_j)$, $j \geq 0$:

$$(\star_j) \; x_{j-1} - \beta x_j = a_j(\beta)$$

où les a_j *sont donnés ainsi que* β. *Alors ce système admet une solution* $x_j = f_j(\beta)$ *où les* f_j *sont* C^∞.

Preuve.–

Soit f_{-1} une fonction C^∞ dont la série de Taylor est $f_{-1} \sim \sum a_j(\beta)\beta^j$, où les $a_j(\beta)$ sont considérés comme séries formelles. On pose $x_{-1} = f_{-1}(\beta)$, puis $x_0 = \frac{f_{-1}(\beta) - a_0}{\beta}$ et ainsi de suite.

□

2.7. **Preuve du théorème 1 : partie (c).** Il est classique que le symbole sous-principal d'un OPD est invariant par conjugaison par OIF en un point où le symbole principal s'annule ainsi que sa différentielle (voir [20] page 390). On calcule donc les symboles sous principaux en z_0 pour Q_0. On a ainsi :

$$\frac{1}{2i}\{p_2, p_1\}(z_0) = e_0(O)(-\frac{1}{2i} - c_{1,0}) \; ,$$

et $\{p_2, p_1\}(z_0) = -e_0(O)$ (équation (12).

2.8. **Birapport et unicité.** Soient $\mathcal{E}$ un sous-espace de dimension 2 de la somme directe de 4 espaces de dimension 1, E_j, $1 \leq j \leq 4$, tel que $\mathcal{E}$ coupe chaque hyperplan $H_j = \oplus_{k \neq j} E_k$ suivant une droite D_j. Soit $m_{1,2,3,4}$ le birapport des 4 droites D_j. Si $\mathcal{E}$ est le graphe d'une application $A : E_1 \oplus E_2 \to E_3 \oplus E_4$ de matrice $(a_{i,j})$, on a

$$m_{1,2,3,4} = \frac{a_{4,1}a_{3,2}}{a_{3,1}a_{4,2}} \; .$$

L'indice α sera souvent implicite dans ce qui suit. D'après [2], l'espace $\mathcal{E}$ des solutions microlocales de $Pu = 0$ près de z_0 est de dimension 2 (comme module sur l'anneau $\mathbb{C}(h)$ des séries formelles en h). Numérotons $1, 2, 3, 4$ les 4 branches comme sur la figure (3) et soient $D_j \subset \mathcal{E}$ la droite des solutions nulles sur la branche j. On définit $m_{1,2,3,4} \in \mathbb{C}(h) \cup \infty$ comme le birapport des 4 droites D_j.

Théorème 2. *On a :*

$$m_{1,2,3,4} = e^{-2\pi\Phi(\alpha,h)/h} \; . \tag{17}$$

Il y a une difficulté pour interpréter cette formule car $\Phi = \Phi_0 + \Phi_1 h + \cdots$ *et qu'on n'obtient pas une série formelle. On tourne la difficulté en couplant* α *et* h *de façon que* $\alpha = O(h)$. *Le birapport prend alors un sens comme série formelle en* (β, h) *avec* $\alpha = h\beta$. *Si* $\alpha \geq Ch^{1+\rho}$ *(avec* $C, \rho > 0$*), on a*

$$m_{1,2,3,4} = \begin{cases} 0, & si\ c_{0,1} > 0; \\ \infty, & si\ c_{0,1} < 0. \end{cases} \tag{18}$$

C'est la formule de Landau-Zener *générale.*

Preuve.–

La formule résulte de la formule (38) de [2]. En effet la matrice de transfert $T(\varepsilon)$ y est donnée par

$$T(\varepsilon) = C(\varepsilon) \begin{pmatrix} 1 & -ie^{-\varepsilon\pi} \\ -ie^{-\varepsilon\pi} & 1 \end{pmatrix} \tag{19}$$

et dans le contexte présent $\varepsilon = \frac{\Phi}{h} + \frac{1}{2i}$.

L'unicité découle alors de l'interprétation géométrique de $m_{1,2,3,4}$.

□

3. Etude de 2 hamiltoniens semi-classiques couplés

On considère un hamiltonien semi-classique

$$H = \begin{pmatrix} P_1 & \epsilon W \\ \epsilon W^\star & P_2 \end{pmatrix} \tag{20}$$

où les P_j (resp. W) sont des OPD d'ordre 0 sur $\mathbb{R}$, de symboles principaux p_j (resp. w). Les P_j sont formellement autoadjoints et $W^\star$ est l'adjoint formel de W. Ainsi H est formellement auto-adjoint. Le cas le plus simple est celui où P_1 et P_2 sont 2 opérateurs de Schrödinger et W une constante complexe non nulle.

On suppose en outre $w_0 = w(z_0) \neq 0$. On s'intéresse aux solutions microlocales du système

$$HU = 0 \ : \begin{cases} P_1 u + \epsilon W v & = 0 \\ P_2 v + \epsilon W^\star u & = 0 \end{cases} \tag{21}$$

près de z_0.

3.1. Opérateur déterminant.

Comme W est elliptique en z_0, on peut l'inverser et on voit que les solutions microlocales du système (21) près de z_0 sont déterminées pour $\epsilon \neq 0$ par les solutions de

$$\begin{cases} Q_\epsilon u & = 0 \\ v & = -\epsilon^{-1} W^{-1} P_1 u \end{cases} \tag{22}$$

avec

$$Q_\epsilon = W P_2 W^{-1} P_1 - \epsilon^2 W W^\star \ = Q_0 - \epsilon^2 W W^\star \ . \tag{23}$$

Le symbole principal q_ϵ de Q_ϵ est $q_\epsilon = p_1 p_2 - \epsilon^2 |w|^2$ qui présente un point col $z(\epsilon)$ avec $z(0) = z_0$.

Si on pose $\epsilon^2 = \alpha$, on peut utiliser les résultats de la section 2 avec $\omega_0 = -|w_0|^2$.

3.2. **Cas de 2 équations de Schrödinger.** On considère le cas où

$$P_j = -\frac{h^2}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V_j(x) - E$$

sont deux opérateurs de Schrödinger. On suppose qu'il existe x_0 tel que $V_1(x_0) = V_2(x_0)$ et $V_1' = V_1'(x_0) \neq V_2' = V_2'(x_0)$ et que $E > V_j(x_0)$.

$$z_0 = (x_0, \pm\sqrt{2(E - V_j(x_0))} = \pm\xi_0)\ .$$

On a alors

$$c_{0,1} = -\frac{|w_0|^2}{|\xi_0||V_1' - V_2'|(x_0)}$$

et comme $\Phi = c_{0,1}\epsilon^2 + O(\epsilon^4) + O(h^2)$, si $\epsilon = O(\sqrt{h})$, $\Phi = c_{0,1}\epsilon^2 + O(h^2)$ et donc sous l'hypothèse $\epsilon = O(\sqrt{h})$:

$$m_{1,2,3,4} = e^{2\pi c_{0,1}\frac{\epsilon^2}{h}} + O(h)\ .$$

3.3. **Courants et unitarité.** Pour une approche voisine, voir [13], §2. La différence est qu'on n'est pas dans un problème global et que l'unitarité doit être défini de façon microlocale.

On considère un OPD vectoriel H (formellement) autoadjoint sur $\mathbb{R}$ de symbole principal $H_0(x,\xi)$, matrice symétrique $n \times n$. On se place près d'un point $z_0 = (x_0, \xi_0) \in T^\star\mathbb{R}$ tel que $\ker(H_0(z_0))$ est de dimension k. Soient $p_1, \cdots, p_k$ les k valeurs propres de H_0 nulles en z_0. On suppose $p_j'(z_0) \neq 0$ (on ne suppose pas que les différentielles sont indépendantes) et (pour simplifier) que z_0 n'est dans la caustique d'aucun de ces p_j. Soit $[a,b]$ un voisinage de x_0 qui ne rencontre aucune des caustiques des p_j. Soient $\mathcal{X}_j$ les champs hamiltoniens des p_j et $\mathcal{B}_j^\pm$ les branches des courbes $p_j = 0$ dont les projections respectives sont $[a, x_0[$ et $]x_0, b]$. On note dt la différentielle sur $\mathcal{B}_j^\pm$ associée au champ $\mathcal{X}_j$ $(dt(\mathcal{X}_j) = 1)$. On se donne $a < a_1 < x_0 < b_1 < b$ et $\varphi \in C_o^\infty(]a,b[)$, égale à 1 sur $[a_1, b_1]$. Soit maintenant $\Omega = [a,b] \times [c,d]$ un rectangle contenant les branches $B_j^\pm$ et ne rencontrant pas la variété caractéristique de H_0 ailleurs que sur ces branches.

Définition 1. *Soient U, V 2 solutions microlocales de $HU = HV = 0$. On définit les* **courants**

$$J_\varphi^-(U,V) = \frac{i}{2h}\int_a^{a_1} < H(\varphi U)|\varphi V > - < \varphi U|H(\varphi V) > dx \tag{24}$$

et de même J_φ^+. Ici $< .|. >$ est le produit scalaire hermitien ponctuel.

On a alors le :

Théorème 3. a)

$$J_\varphi^+(U,V) = J_\varphi^-(U,V) + O(h^\infty)\ .$$

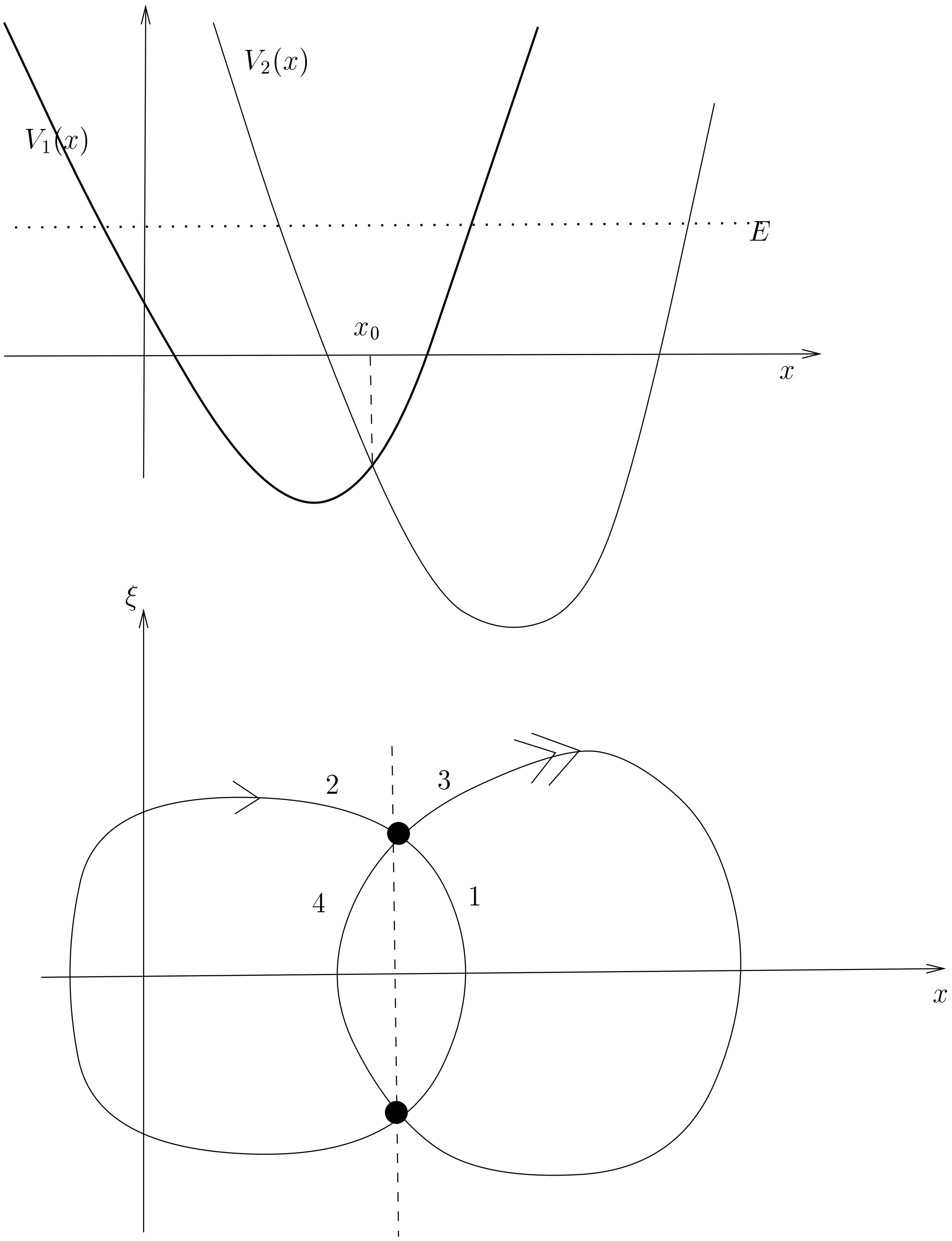

FIGURE 4. le cas de 2 équations de Schrödinger

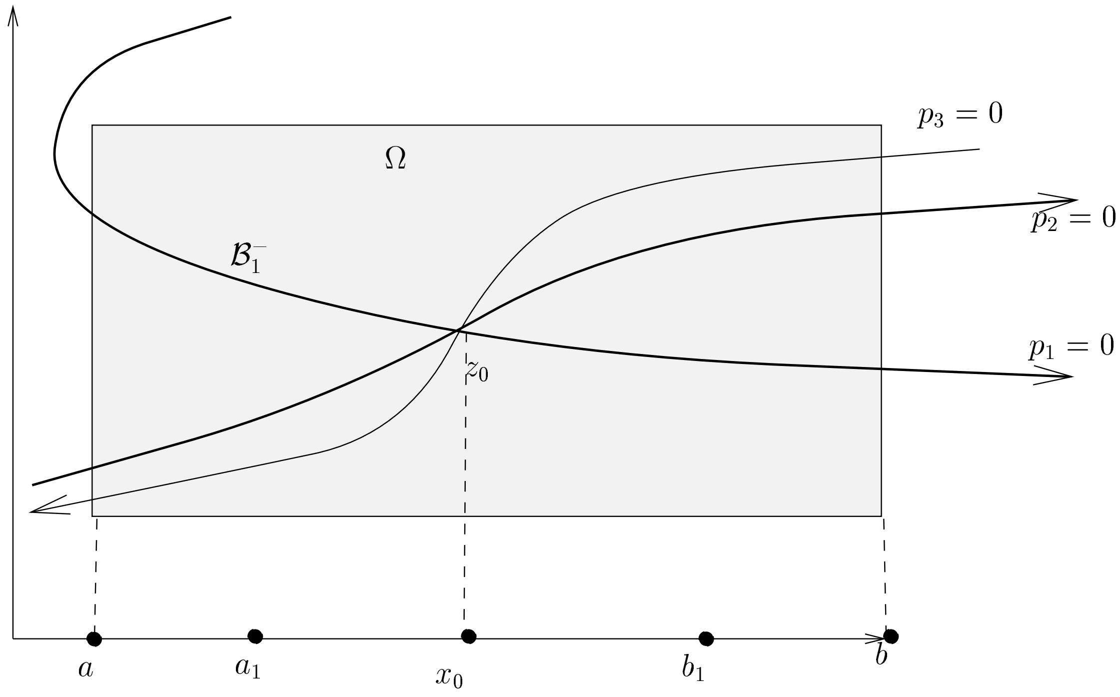

FIGURE 5. courants ($k = 3$)

b) *Si U et V sont à microsupports dans 2 branches $\mathcal{B}_j^-$ distinctes,*

$$J_\varphi^-(U,V) = O(h^\infty) \ .$$

c) *Si $\mu_{j,U}$ sont les mesures de Husimi de U sur $\mathcal{B}_j^\pm$ et $a_j^\pm = \frac{d\mu_j^\pm}{dt}$, on a :*

$$J_\varphi^\pm(U) = \sum_{j=1}^k a_j^\pm + O(h) \ .$$

Donc l'index de $J_\varphi^\pm$ est donné par le nombre de branches qui sont orientées vers les x décroissants.

Preuve.–

a) Sur $[a_1, b_1]$, on a :

$$H(\varphi U) = H(U) + O(h^\infty) = O(h^\infty) \ ,$$

et V est à croissance modérée en h.

b) C'est une application élémentaire de la formule de la phase stationnaire :

$$\int e^{i(S_j'(x) - S_k'(x))/h} a(x) dx$$

est $O(h^\infty)$ si $a \in C_o^\infty$ et $S_j' - S_k'$ ne s'annule pas sur $\mathrm{Supp}(a)$.

c) Soit $U(x) = \sum_j A_j(x)e^{iS_j(x)/h} + O(h)$, $\pi_j : \mathcal{B}_j^- \to \mathbb{R}$ et $\sigma_j^- = \pi_j^\star(A_j|dx|^{1/2})$ les symboles principaux. Les mesures de Husimi portées par les branches et invariantes par les flots hamiltoniens sont $|\sigma_j|^2|dt|$. Le symbole principal de $\frac{i}{h}H(U)$ sur la branche $\mathcal{B}_j^-$ est $\frac{d\varphi}{dt}\sigma_j^-$. Donc le courant peut s'évaluer par

$$J_\varphi^-(U) = \sum_j \pm \int_a^{a_1} \varphi \frac{d\varphi}{dx}|A_j|^2$$

où $\pm$ dépend du fait que $\mathcal{X}_j$ soit orienté dans le sens des x croissants ou non.

□

Dans le cas de système d'équations de Schrödinger ces signes dépendent uniquement du signe de ξ_0.

3.4. **La formule de Landau-Zener.** Soient E_j, $j = 1, \cdots, 4$ les espaces de solutions microlocales de $HU = 0$ sur les branches j (voir figure 3). $E_- = E_2 \oplus E_4$ et $E_+ = E_1 \oplus E_3$ sont des espaces hermitiens pour le produit défini par les courants et si $\mathcal{E}$ est l'espace des solutions microlocales près de z_0, $\mathcal{E}$ est le graphe d'une transformation unitaire T de E_- dans E_+.

Théorème 4. *(Formule de Landau-Zener) On a dans une base orthonormée pour les courants*

$$T = (t_{i,j})$$

avec :

$$|t_{1,2}| = |t_{3,4}| + O(h^\infty) = e^{\pi\Phi(\epsilon^2,h)/h} + O(h^\infty) \ .$$

où Φ vérifie :

$$\Phi(\epsilon^2, h) = -\frac{|w_0|^2}{|\{p_1, p_2\}(z_0)|}\epsilon^2 + O(\epsilon^4) + O(h^2) \ .$$

La démonstration est une application du

Lemme 2. *Avec les notations de la section (2.8), si $\mathcal{E}$ est le graphe d'une application unitaire $T : E_2 \oplus E_4 \to E_1 \oplus E_3$ où les espaces sont hermitiens et les sommes orthogonales, la matrice de T dans des bases orthonormées (e_2, e_4, e_1, e_3) des E_j vérifie*

$$|t_{1,2}|^2 = |t_{3,4}|^2 = (m_{1,2,3,4})^{-1} \ .$$

4. Cas adiabatique

Dans ce cas les p_j sont donnés par $p_j(t, \tau) = \tau + \lambda_j(t)$. On retrouve la formule de Landau-Zener adiabatique :

Théorème 5. *On a dans une base orthonormée pour les courants*

$$T = (t_{i,j})$$

avec :

$$|t_{1,2}| = |t_{3,4}| + O(h^\infty) = e^{\pi\Phi(\epsilon^2,h)/h} + O(h^\infty) \ .$$

où Φ *vérifie :*

$$\Phi(\epsilon^2, h) = -\frac{|w_0|^2}{|\lambda_1'(t_0) - \lambda_2'(t_0)|}\epsilon^2 + O(\epsilon^4) + O(h^2) \ .$$

5. Extensions et remarques

5.1. **Bohr-Sommerfeld.** Dans [4], nous montrons comment calculer le spectre et les résonances pour 2 oscillateurs couplés en utilisant en particulier le théorème 1. Une application à la matrice $\mathcal{S}$ et aux *oscillations de Stückelberg* ([13] p. 241) y est donnée.

5.2. **Le cas dépendant du temps.** Donnons seulement l'intuition ; la limite classique de l'équation de Schrödinger

$$\frac{h}{i}\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{25}$$

peut être décrite ainsi : sur la couche d'énergie E on a deux systèmes hamiltoniens indépendants d'hamiltoniens p_1 et p_2. L'espace des phases d'énergie E est donc formé de la réunion disjointe des courbes $X_1 = \{p_1 = E\}$ et $X_2 = \{p_2 = E\}$. Lorsque la trajectoire sur X_1 ou X_2 passe par un point de croisement z_0, la dynamique est probabiliste avec des probabilités de transition de X_1 à X_1 ou X_2 données par la formule de Landau-Zener. La limite classique est donc un processus stochastique !

Pour donner des énoncés précis, il faut recourir à l'analogue avec petit paramètre de la théorie de Guillemin-Melrose-Uhlmann des opérateurs intégraux de Fourier associés à des couples de variétés lagrangiennes qui se coupent transversalement au sens de Bott (voir [14], [6], [20]).

Un travail est en préparation sur cette question.

Bibliographie

[1] M. Carré, A. Zgainsky, M. Gaillard, M. Nouh, M. Lombardi, Détermination des populations relatives des sous-niveaux magnétiques du niveau 4 ^1D de HeI excité par impact d'ions lourds, *Journal de Physique,* 42:235-246 (1981).

[2] Y. Colin de Verdière et B. Parisse, Equilibre instable en régime semi-classique : I–Concentration microlocale. *Commun. PDE*, 19:1535-1563 (1994).

[3] Y. Colin de Verdière et B. Parisse, Equilibre instable en régime semi-classique : II–Conditions de Bohr-Sommerfeld. *Ann. Inst. Henri Poincaré (Physique théorique)*, 61:347-367 (1994).

[4] Y. Colin de Verdière et B. Parisse, Conditions de Bohr-Sommerfeld singulières, *en préparation.*

[5] Y. Colin de Verdière et J. Vey, Le lemme de Morse isochore *Topology*, 18:283–293 (1979).

[6] V. Guillemin, G. Uhlmann, Oscillatory integrals with singular symbols, *Duke Math. J.*, 48:251-267 (1981).

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

[8] G. A. Hagedorn, Molecular Propagation through Electron Energy Level crossings, *Memoirs of the AMS*, 536 (1994).

[9] G. A. Hagedorn et A. Joye, Landau-Zener Transitions through small electronic eigenvalues gaps in the Born-oppenheimer approximation *Ann. IHP (physique théorique),* 68:85–134 (1998).

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

[11] A. Joye, Exponential asymptotics in a singular limit for n-level scattering systems, *SIAM J. Math. Anal.,* 28:669–703 (1997).

[12] L. Landau, *Collected papers of L. Landau*, Pergamon Press, 1965.

[13] P. Martin et G. Nenciu, Semi-classical inelastic S-matrix for one dimensional N-states systems, *Reviews in Mathematical Physics,* 7:193–242 (1995).

[14] R. Melrose et G. Uhlmann, Lagrangian intersection and the Cauchy problem, *Comm. Pure Appl. Math.,* 32:483–519 (1979).

[15] J. Pollet, Analyse semi-classique d'un système d'équations de Schrödinger couplées : formule de Landau-Zener. *Thèse de l'université de Grenoble 1*, octobre 1997.

[16] D. Robert, Autour de l'approximation semi-classique, *Birkhäuser,* 1987.

[17] H. Rosenthal, Nonadiabatic Effects in Slow Atomic Collisions. I. $He^+ + He$, *Phys. Rev.,* A4:1030-1042 (1971).

[18] M. Rouleux, Feshbach resonances in the semi-classical limit, *Preprint CPT*, 1997.

[19] E.C.G. Stueckelberg, *Helv. Phys. Acta,* 5:369 (1932).

[20] M. Taylor, Pseudo-differential operators, *Princeton,* 1981.

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