Bull. Soc. math. France
130 (1), 2002, p. 123–168

MESURES SEMI-CLASSIQUES ET CROISEMENT DE MODES

PAR CLOTILDE FERMANIAN-KAMMERER & PATRICK GÉRARD

RÉSUMÉ. — L'étude de la dynamique semi-classique d'électrons dans un cristal débouche naturellement sur le problème de l'évolution des mesures semi-classiques en présence d'un croisement de modes. Dans ce travail, nous étudions un système 2×2 qui présente un tel croisement. À cet effet, nous introduisons des mesures semi-classiques à deux échelles qui décrivent comment la transformée de Wigner usuelle se concentre sur l'ensemble des trajectoires rencontrant ce croisement. Puis nous établissons des formules explicites de type Landau-Zener reliant les traces de ces mesures de part et d'autre du croisement.

ABSTRACT (*Semi-classical measures and eigenvalue crossings*). — Semiclassical study of multidimensional crystals leads naturally to the following question: how do semi-classical measures propagate through energy level crossings ? In this contribution, we discuss a simple 2×2 system which displays such a crossing. For that purpose, we introduce two-scaled semi-classical measures, which describe how the usual Wigner transforms are concentrating on trajectories passing through the crossing points. Then we derive explicit formulae for the branching of such measures. These formulae are generalizations of the so-called Landau-Zener formulae.

Texte reçu le 6 avril 2001, accepté le 3 juillet 2001

CLOTILDE FERMANIAN-KAMMERER, Université de Cergy-Pontoise, Mathématiques, 2 avenue Adolphe Chauvin, BP 222, 95302 Cergy-Pontoise Cedex (France)
E-mail : `Clotilde.Fermanian@math.u-cergy.fr`
PATRICK GÉRARD, Université Paris XI, Mathématiques, Bât. 425, 91405 Orsay (France)
E-mail : `Patrick.GERARD@math.u-psud.fr`

Classification mathématique par sujets (2000). — 35B27, 35L, 35Q40.

Mots clefs. — Mesures semi-classiques (de Wigner), valeurs propres de multiplicité variable, formule de Landau-Zener, convergence à deux échelles.

Le présent travail a été réalisé avec le support du réseau européen TMR « Asymptotic Methods in Kinetic Equations », contrat ERB FMRX CT97 057.

© Société Mathématique de France

1. Introduction

1.1. Position du problème. — La dynamique semi-classique d'électrons dans un cristal a fait l'objet de plusieurs travaux récents (voir par exemple [8], [11], [22], [26]). 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 [4]), 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 $\xi = (\xi_1, \xi_2) \in \mathbb{R}^2$, la matrice

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

a deux valeurs propres distinctes qui dégénèrent en une valeur propre double pour $\xi = 0$.

Ce modèle est le linéarisé en 0 du modèle générique d'une matrice symétrique réelle d'ordre 2 et de trace nulle, dépendant de deux paramètres réels, et présentant le même phénomène de croisement (voir par exemple [13]). Nous renvoyons à la fin de cette introduction pour des commentaires sur d'éventuelles généralisations de nos résultats au cas générique.

Soit $V : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ une fonction de classe C^∞. Alors, pour tout réel $h > 0$, l'opérateur différentiel

$$H^h = A(hD_x) + V(x) \tag{2}$$

est essentiellement autoadjoint sur l'espace $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$. 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

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

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 [12], [13] et Hagedorn-Joye [14]. Ici, nous souhaitons obtenir des informations pour des familles (ψ_0^h) générales, satisfaisant seulement à la condition suivante, dite de h-oscillation dans [10],

$$\limsup_{h\to 0} \int_{h|\xi|\geq R} \left|\widehat{\psi_0^h}(\xi)\right|^2 \mathrm{d}\xi \underset{R\to\infty}{\longrightarrow} 0, \tag{4}$$

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

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

qui sont des mesures positives à valeurs dans les matrices 2×2 hermitiennes (voir par exemple [10], [11], [21]), 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 [11] permettent d'obtenir la formule

$$\mu = \mu^+\Pi^+ + \mu^-\Pi^-, \tag{6}$$

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

$$\Pi^\pm(\xi) = \frac{1}{2}\Big(1 \pm \frac{A(\xi)}{|\xi|}\Big) \tag{7}$$

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

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

et aux conditions initiales

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

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.

1.2. Comportement des trajectoires classiques et introduction d'une nouvelle échelle. — Il est naturel d'étudier d'abord les trajectoires classiques associées à ce système et atteignant le croisement $\{\xi = 0\}$. De telles trajectoires peuvent être aisément décrites dans une zone où le potentiel V n'a pas de point critique. Précisément, si $x \in \mathbb{R}^2$ est tel que $\nabla V(x) \neq 0$, on montre qu'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

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

avec les conditions initiales $x_0^\pm = x$, $\xi_0^\pm = 0$.

Sur la trajectoire associée à un mode, on remarque que la quantité $\dot{x}$ change de signe lorsque ξ passe par la valeur 0. En revanche, la portion future ($s \geq 0$) de la trajectoire associée à un mode se raccorde de façon régulière à la portion passée ($s \leq 0$) de la trajectoire associée à l'autre mode (c'est d'ailleurs un fait que l'on retrouve dans le modèle générique, voir le §1.6).

En résumé, une particule classique atteignant $\{\xi = 0\}$ en un tel point x a le choix entre rester sur cette trajectoire, suivre la trajectoire associée à l'autre mode, ou rester en $\{\xi = 0\}$. On peut montrer que cette dernière possibilité n'a jamais lieu si $\nabla V(x) \neq 0$, au sens où la mesure semi-classique de (ψ^h) ne charge pas l'ensemble singulier $\{\xi = 0\}$ (*cf.* §4). Nous allons voir que le choix entre les deux possibilités restantes se traduit par 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.

Supposons donc pour un moment $V(x) = x_1$, et, pour fixer les idées, plaçons-nous 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

$$x_t^{\pm} = x_0 + \big(\mp|t_0 - t|, 0\big), \quad \xi_t^{\pm} = (t_0 - t, 0).$$

Les projecteurs spectraux le long de ces courbes vérifient

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

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

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

Il est alors naturel d'effectuer le changement d'échelle $s = \xi_1/\sqrt{h}$, $\eta = \xi_2/\sqrt{h}$ qui permet d'éliminer le paramètre h de l'équation et de se ramener au système d'équations différentielles ordinaires

$$\frac{1}{i}\partial_s u = \begin{pmatrix} s & \eta \\ \eta & -s \end{pmatrix} u, \tag{10}$$

en posant

$$u(s, t, \eta) = \widehat{\psi}^h(t - \xi_1, \xi_1, \xi_2). \tag{11}$$

Près des trajectoires classiques, on a $\xi_1 \sim (t_0 - t)$ donc $s \sim (t_0 - t)/\sqrt{h}$, de sorte que le passage de $t < t_0$ à $t > t_0$ pour le système (3) correspond à un problème de scattering pour (10) paramétré par η. Il se trouve que la matrice de scattering pour ce système peut être calculée explicitement en fonction de η, comme l'avaient déjà remarqué Landau [20] et Zener [29] (voir aussi Joye [18] pour un résultat abstrait dans le cadre de la théorie adiabatique). Observons

que la quantité $\eta = \xi_2/\sqrt{h}$ décrit la concentration à l'échelle $\sqrt{h}$ de la transformée de Wigner sur l'ensemble des trajectoires classiques rencontrant $\xi = 0$, puisque celui-ci est inclus dans l'hypersurface $I = \{\xi_2 = 0\}$. Ces remarques font apparaître l'importance du rôle joué par la nouvelle échelle caractéristique $\sqrt{h}$. Comme on va le voir, cette échelle joue un rôle analogue dans le cas d'un potentiel quelconque. Nous sommes conduits à décrire la concentration de la transformation de Wigner sur des sous-variétés involutives de l'espace cotangent, à l'échelle $\sqrt{h}$: c'est l'objet des mesures semi-classiques à deux échelles.

1.3. Mesures semi-classiques à deux échelles. — Soit (u^h) une famille bornée de $L^2(\mathbb{R}^d)$, notons

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

la transformée de Wigner de u^h, et μ la mesure semi-classique de (u^h). Rappelons que, si $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$,

$$\int_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} W^h u^h(x,\xi)\, a(x,\xi)\mathrm{d}x\mathrm{d}\xi = \big(\mathrm{op}_h(a)u^h \mid u^h\big),$$

où $(\ \mid\ )$ désigne le produit scalaire sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et $\mathrm{op}_h(a)$ est le quantifié de Weyl associé au symbole a.

Soient $p \in [1,d]$ un entier et $g = (g_1,\dots,g_p) : M = T^*\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^p$ une application de classe C^∞ telle que $\mathrm{d}g_1,\dots,\mathrm{d}g_p$ soient indépendantes sur $I = \{g = 0\}$, et telle que $\{g_i, g_j\} = 0$ pour tous i,j. On désigne par $\mathcal{A}$ l'espace des fonctions $a = a(x,\xi,\eta)$ de classe C^∞ sur $M \times \mathbb{R}^p_\eta$, à support dans $K \times \mathbb{R}^p_\eta$, où K est une partie compacte de M, et telles qu'il existe une fonction $a_\infty = a_\infty(x,\xi,\omega)$ sur $M \times S^{p-1}$ vérifiant

$$a(x,\xi,\eta) = a_\infty\Big(x,\xi,\frac{\eta}{|\eta|}\Big)$$

si $|\eta| \geq R$ pour un certain $R = R(a) \in \mathbb{R}^+$. Par ailleurs, on note $\overline{\mathbb{R}^p}$ le compactifié de $\mathbb{R}^p$ obtenu en ajoutant une sphère à l'infini, et on prolonge a à $\overline{\mathbb{R}^p}$ par continuité.

Le théorème suivant est démontré au paragraphe 2.

Théorème 1. — *Il existe une suite (h_k) tendant vers 0 et une mesure positive ν_g sur $I \times \overline{\mathbb{R}^p}$ telles que, pour tout $a \in \mathcal{A}$, on ait*

$$\int_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} W^h u^h(x,\xi)\, a\Big(x,\xi,\frac{g(x,\xi)}{\sqrt{h}}\Big)\mathrm{d}x\mathrm{d}\xi$$
$$\underset{\substack{h\to 0\\ h=h_k}}{\longrightarrow} \int_{I\times\overline{\mathbb{R}^p}} a(x,\xi,\eta)\mathrm{d}\nu_g(x,\xi,\eta) + \int_{M\setminus I} a_\infty\Big(x,\xi,\frac{g(x,\xi)}{|g(x,\xi)|}\Big)\mathrm{d}\mu(x,\xi).$$